



Dpto. de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica II
Facultad de CC. Físicas
Universidad Complutense de Madrid

Memoria de Tesis Doctoral

ASTROFÍSICA MOLECULAR: CARACTERIZACIÓN DE ENVOLTURAS CIRCUNESTELARES Y PROCESOS COLISIONALES EN EL LABORATORIO

José Pablo Fonfría Expósito

Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja
Dpto. de Física Molecular
Instituto de la Estructura de la Materia
Consejo Superior de Investigaciones Científicas

Madrid, 2008

Programa de Doctorado “Astrofísica y Ciencias de la atmósfera”
Dpto. de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica II
Facultad de CC. Físicas
Universidad Complutense de Madrid

Memoria de Tesis Doctoral

Astrofísica Molecular: caracterización de envolturas circunestelares y procesos colisionales en el laboratorio

José Pablo Fonfría Expósito

Directores

Prof. José Cernicharo Quintanilla

Prof. Salvador Montero Martín

Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja
Dpto. de Física Molecular
Instituto de la Estructura de la Materia
Consejo Superior de Investigaciones Científicas

Madrid, 2008

Agradecimientos

Lo que parecía tan lejano cuando me decidí a comenzar el doctorado ya ha llegado. Durante todos estos años he estado centrado principalmente en aprender y hacer lo mejor posible las investigaciones que en esta Tesis se presentan, pensando que aún quedaba lejos el final...

En las siguientes páginas hay mucho de mí, de cómo he entendido lo que me han explicado y de cómo he interpretado lo que he ido viendo. Sin embargo, este texto y los trabajos que contiene son el resultado de la labor de muchísima gente, más de lo que en un principio me hubiera parecido. Por lo tanto, es el momento de los agradecimientos a todos aquéllos que, aún sin saberlo, han contribuido a que esta Tesis Doctoral que lleva mi nombre vea la luz.

En primer lugar, quiero agradecer a mis dos directores de Tesis, los Profs. José Cernicharo y Salvador Montero, toda la confianza que han depositado en mí, la ayuda que me han proporcionado en todo momento y la grandísima cantidad de cosas que me han ayudado a aprender. Ambos han sido un gran ejemplo para mí, mostrándome cómo ha de ser un gran investigador.

Agradezco a toda la gente del DAMIR que ha estado a mi lado y me ha ayudado con apoyo, conversaciones, correcciones, comentarios, consejos y de otros muchos modos a que esta Tesis haya llegado a buen puerto (en especial Marcelino, Miguel, Macarena, Alicia, Javier, Juan Ramón y M^a Luisa).

También quiero agradecer todo lo que han hecho por mí José María y Guzmán o Guzmán y José María porque, sinceramente, no sé a quién poner antes. Ellos han sido con los que he trabajado más de cerca en el laboratorio y los que han aguantado buena parte de mis preguntas, comentarios, y errores, dándome siempre buenas respuestas y haciendo muy agradable y enriquecedor el trabajo en equipo.

A continuación, quiero agradecer a la que fue mi tutora en la UCM, la Profa. M^a José Fernández Figueroa, por sus comentarios sobre la Tesis.

Al Dr. Matthew J. Richter le agradezco todas las interesantes conversaciones que tuve con él vía correo electrónico, ayudándome además a mejorar mi inglés escrito sin desesperarse.

Mil gracias al Dr. Laurent Loinard por acogerme en el Centro de Radioastronomía y Astrofísica (CRyA) en México en el verano del año 2006. Gracias a su ayuda y conocimientos me llegué a familiarizar con la interferometría, siendo capaz de mirar las estrellas de otra manera.

También quisiera agradecer de forma muy especial al Dr. Alejandro Palma por haberme recibido tan bien en México, permitido trabajar con él y haberme financiado a través de sus proyectos. Por otro lado, le agradezco al Dr. Francisco Meléndez el haber respondido a todas mis preguntas y haber tenido conmigo tan buena disposición e interesantes charlas. Además, le agradezco a la Benemérita Universidad de Puebla y al Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas" el haberme acogido durante varios meses mientras acababa de escribir la Tesis.

Ninguno de los trabajos realizados hubiera sido posible sin la financiación provista por numerosas organizaciones lideradas por el CSIC y el Fondo Social Europeo, que me concedió la beca IzP que disfruté durante la mayor parte de mi doctorado. Igualmente, también quiero agradecer al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) el haberme apoyado durante mi estancia en México en las etapas finales de la escritura de esta Tesis a través del proyecto del Dr. Alejandro Palma SEP-2004-C01-47090.

Les doy las gracias de todo corazón a mis padres, José y Milagros, porque gracias a ellos estoy aquí en todos los sentidos. Gracias por hacerme lo suficientemente curioso como para meterme en esto de la investigación. Gracias por hacerme lo suficientemente fuerte como para no dejarlo. Gracias por hacerme lo suficientemente inteligente como para poder seguir adelante. Muchas gracias.

Les doy las gracias a mis hermanas, Laura, Inmaculada, Teresa y Montserrat, por estar ahí, por apoyarme siempre como lo han hecho, por sentirse orgullosas de mí y por ayudarme a llegar hasta donde estoy.

Les doy las gracias a mis suegros, Leopoldo y Yolanda, y a mis cuñados, Hiram y Marco, por acogerme y quererme como lo hacen, todos los días y bajo cualquier circunstancia. Si esta Tesis ha salido es en gran parte por su cariño y su amistad, haciendo muchísimo más llevadero el trauma que supone un cambio de país.

Y, por último, le doy las gracias con todo mi amor a mi esposa, Wilma, por ser mi esposa, mi amiga, mi compañera, mi látigo, mi puente, mi puerta, mi apoyo, mi brújula y la luz que ilumina mis pasos. Sin tí esto no hubiera sido posible.

*José Pablo Fonfría Expósito
Noviembre del 2008
México D.F.*

Prefacio

La inmensa mayoría de la materia ordinaria del Universo se encuentra en forma de gas. Este gas puede encontrarse en estrellas o nubes interestelares, discos protoplanetarios o envolturas circunestelares, en las zonas densas de las galaxias o en el propio espacio intergaláctico. El gas de cada medio posee sus propias características a causa de los fenómenos físicos que le afectan. Sus condiciones físicas junto con su riqueza en metales, proporcionan la gran variedad de especies químicas detectadas (y no detectadas todavía) dentro y fuera del Sistema solar.

Las estrellas de la Rama asintótica de las gigantes (AGB) y las que están en el siguiente estadio de la evolución estelar, las Nebulosas planetarias (PN), son objetos muy valiosos de cara al entendimiento de los fenómenos físicos presentes en las estrellas. La violencia de estos fenómenos junto con la velocidad a la que se produce la transición entre una fase y otra (unos pocos cientos de años) hacen de estos objetos laboratorios en potencia, tanto física como químicamente.

Actualmente, la única manera conocida de obtener información de objetos extrasolares es a través de la detección de radiación electromagnética, intensamente acoplada a la materia. Esta interacción es lo suficientemente fuerte como para que el equilibrio (o la falta de éste) entre la materia y la radiación determine la evolución dinámica de las acumulaciones de gas y el espectro de la propia radiación que interactúa con él.

El caso de las estrellas AGB y PNe es un ejemplo claro de los efectos de la interacción entre la interacción entre la radiación y materia. Es esta interacción la que crea las nebulosas que rodean a las estrellas centrales (fase AGB) expulsando parte de la materia de la fotosfera estelar. Esta interacción también parece ser la causante de la eyección final de gran parte de la atmósfera de la estrella dejando el núcleo al descubierto (fase PN). Y es esa interacción la que expulsa definitivamente hacia el medio interestelar toda la materia eyectada, dejando como resto una enana blanca y enriqueciendo el medio interestelar con metales procesados que formarán parte de la nueva generación de estrellas.

Sin embargo, la interacción entre la radiación y la materia no es el único fenómeno del que depende la evolución de estos y otros muchos objetos. En un gas en equilibrio macroscópico con una cierta temperatura cinética, cada segundo se produce un inmenso número de colisiones entre las partículas que lo forman. Estas colisiones unidas a la excitación radiativa, tienen la capacidad de transformar la energía mecánica en radiación y viceversa.

Consideremos una molécula únicamente con dos niveles de energía, *up* y *low*, y cuyas energías son E_{up} y E_{low} , respectivamente ($E_{\text{up}} > E_{\text{low}}$). Supongamos que estos dos niveles están conectados radiativa y colisionalmente, con constantes de Einstein $A_{\text{up} \rightarrow \text{low}}$, $B_{\text{up} \rightarrow \text{low}}$ y $B_{\text{low} \rightarrow \text{up}}$, y con constantes colisionales $C_{\text{up} \rightarrow \text{low}}$ y $C_{\text{low} \rightarrow \text{up}}$. Si esta molécula está inmersa en un medio gaseoso con temperatura cinética T_K y sometido a la acción de un campo radiativo con una temperatura de cuerpo negro T_{bb} , utilizando el Principio del balance detallado se puede demostrar que

$$\frac{n_{\text{up}}}{n_{\text{low}}} = \frac{g_{\text{up}}}{g_{\text{low}}} \frac{e^{-\beta\nu/T_{\text{bb}}} + xe^{-\beta\nu/T_K} (1 - e^{-\beta\nu/T_{\text{bb}}})}{1 + x - xe^{-\beta\nu/T_{\text{bb}}}}, \quad (1)$$

donde $\beta = hc/k_B = 1.4388 \text{ cm K}$, ν es la frecuencia en cm^{-1} y $x = C_{\text{up} \rightarrow \text{low}}/A_{\text{up} \rightarrow \text{low}}$. Es posible redefinir el parámetro $x = n/n_c$, siendo n_c la *densidad característica* del gas estudia-

do. Si $n \gg n_c$, $x \gg 1$ y $n_{\text{up}}/n_{\text{low}} \sim (g_{\text{up}}/g_{\text{low}}) e^{-\beta\nu/T_K}$, comportándose el gas térmicamente. Por el contrario, si $n \ll n_c$ ($x \ll 1$), $n_{\text{up}}/n_{\text{low}} \sim (g_{\text{up}}/g_{\text{low}}) e^{-\beta\nu/T_{\text{bb}}}$ y el gas se comporta de forma radiativa. Definiendo la *temperatura de excitación* como aquella que cumple que $n_{\text{up}}/n_{\text{low}} = (g_{\text{up}}/g_{\text{low}}) e^{-\beta\nu/T_{\text{exc}}}$ para cualquier valor de x , se demuestra que:

- $\min\{T_K, T_{\text{bb}}\} \leq T_{\text{exc}} \leq \max\{T_K, T_{\text{bb}}\}$,
- T_{exc} es monótonamente creciente o decreciente para cualquier valor de x dependiendo de los valores de T_K y T_{bb} del problema, y
- si $T_K = T_{\text{bb}}$ entonces $T_{\text{exc}} = T_K = T_{\text{bb}}$.

Estas deducciones indican que las poblaciones de los niveles *up* y *low* dependen fuertemente tanto del campo radiativo en el cual está inmerso la molécula considerada como de las colisiones entre las moléculas de gas, pudiendo ambos efectos tener la misma importancia.

Es posible aproximar las condiciones físicas de un gas en el espacio utilizando únicamente nuestro conocimiento de los fenómenos radiativos, pero en muchos casos los resultados pueden ser aproximaciones poco realistas. Por lo tanto, para obtener resultados cuantitativos que representen la realidad acerca de las condiciones físicas del gas y su evolución dinámica, es absolutamente necesario conocer cómo se producen esas colisiones y qué efectos tienen en el gas considerado. Por ejemplo, pequeñas diferencias en las condiciones físicas de una nube en colapso pueden determinar la formación de una o varias estrellas, o incluso inhibir dichas formaciones.

Estas son las razones que me han inducido a realizar las investigaciones que presento en esta Tesis doctoral. Por un lado, la necesidad de estudiar los objetos que se pueden encontrar en el Universo para entender nuestros orígenes más remotos y el lugar donde vivimos; por otro, la de obtener toda la información posible sobre los procesos colisionales que dirigen en la sombra junto con la gravedad la formación y evolución de gran parte de lo conocido.

José Pablo Fonfría Expósito
Noviembre del 2008
México D.F.

Índice general

Agradecimientos	I
Prefacio	III
Índice general	V
Índice de figuras	X
Índice de tablas	XIII
Lista de abreviaturas y siglas	XV
I Las regiones internas de las envolturas de las estrellas evolucionadas	1
1 Estrellas AGB y PPNe	3
1.1. Introducción a las estrellas de tipo AGB y post-AGB	3
1.1.1. Evolución estelar de una estrella de masa intermedia	3
1.1.2. Eyección de materia en las estrellas AGB	8
1.1.3. Velocidad de expansión	9
1.1.3.1. Aceleración por pulsación	9
1.1.3.2. Aceleración por presión de radiación	10
1.1.3.3. Proceso de aceleración	11
1.1.4. Química circunestelar	15
1.1.5. Máseres en estrellas evolucionadas	18
1.1.6. El polvo circunestelar	18
1.1.7. Nebulosas protoplanetarias	20
1.1.8. Química en nebulosas protoplanetarias	21
1.2. El caso de la estrella AGB IRC+10216	22
1.2.1. Algunos datos globales	22
1.2.2. El gas en IRC+10216	22
1.2.3. El polvo en IRC+10216	26
1.3. El caso de la PPN CRL618	30
1.3.1. Estructura y propiedades físicas de CRL618	30
1.3.2. Química en CRL618	32
2 Espectroscopía Molecular	35
2.1. Moléculas lineales	35
2.1.1. El momento angular vibracional	38
2.1.2. Simetrías y paridades	38
2.1.3. Bandas, ramas y subramas	40
2.1.4. Degeneración	41
2.1.5. Reglas de selección rovibracionales	42

2.1.6.	Intensidad de línea	43
2.2.	Casos particulares	44
2.2.1.	C_2H_2 , $H^{13}CCH$ y $^{13}C_2H_2$	44
2.2.2.	C_4H_2	44
2.2.3.	C_6H_2	46
2.2.4.	C_8H_2	46
2.2.5.	HCN y $H^{13}CN$	47
2.2.6.	SiS	48
3	Transferencia de radiación y modelo desarrollado	51
3.1.	Teoría de la transferencia de la radiación	51
3.1.1.	Transferencia de radiación	51
3.1.2.	Introducción a la teoría del efecto máser	54
3.1.3.	Anchura de una línea máser	56
3.1.4.	Mecanismos de bombeo máser	56
3.1.4.1.	Mecanismo clásico de bombeo máser	57
3.2.	Métodos de transferencia radiativa	57
3.3.	Desarrollo del modelo de CSE	59
3.3.1.	Hipótesis planteadas y consideraciones iniciales	59
3.3.2.	Geometría	61
3.3.3.	Velocidades de expansión del gas y del polvo	62
3.3.4.	Temperatura del gas	63
3.3.4.1.	Temperaturas de rotación y vibración	63
3.3.4.2.	Perfiles de temperatura	64
3.3.5.	Temperatura del polvo	65
3.3.6.	Densidad y opacidad del gas	66
3.3.7.	Abundancias moleculares	67
3.3.8.	Densidad y opacidad del polvo	67
3.3.9.	Intensidad de línea	69
3.3.10.	Perfiles de línea	69
3.3.11.	Anchura de línea	70
3.3.11.1.	Anchura térmica	70
3.3.11.2.	Anchura de microturbulencia	70
3.3.12.	Función de partición	70
3.3.13.	Cálculo del flujo	71
3.3.13.1.	Flujo emitido por el sistema	71
3.3.13.2.	La rendija de entrada del monocromador	73
3.3.13.3.	Detección	74
3.3.14.	Introducción de perturbaciones puntuales	74
3.3.15.	Cálculo de errores	77
3.3.16.	Código desarrollado	78
4	La zona de aceleración de la CSE de IRC+10216	79
4.1.	Observaciones	80
4.2.	Condiciones iniciales y procedimiento	88
4.3.	La emisión del continuo	90
4.4.	Modelado de acetileno, C_2H_2	91
4.4.1.	Perfil de velocidades	91
4.4.2.	Anchura de línea	93
4.4.3.	Temperatura cinética, T_K	93
4.4.4.	Temperaturas rotacionales, T_{rot}	95
4.4.5.	Temperaturas vibracionales	97
4.4.6.	Abundancias	101
4.5.	Modelado de $H^{13}CCH$ y $^{13}C_2H_2$	102

4.5.1.	Abundancias	102
4.5.2.	Temperaturas vibracionales	102
4.5.3.	Temperaturas rotacionales	104
4.5.4.	Buscando $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$	104
4.6.	Modelado del cianuro de hidrógeno, HCN y H^{13}CN	105
4.6.1.	Temperaturas vibracionales	106
4.6.2.	Temperaturas rotacionales	107
4.6.3.	Abundancias	108
4.7.	Sensibilidad del código a diversos parámetros y discusión	108
4.8.	Conclusiones	112
5	Emisión máser de SiS en IRC+10216	115
5.1.	Observaciones	115
5.2.	Resultados y discusión	117
6	La abundancia de los políinos C_4H_2, C_6H_2 y C_8H_2 en CRL618	125
6.1.	Observaciones	125
6.2.	Resultados y discusión	127
6.3.	Conclusiones	134
7	Discusión global y perspectivas	137
7.1.	Nuevos datos sobre evolución estelar	137
7.2.	Perspectivas y futuros estudios	139
II	Determinación experimental de tasas de transferencia colisional moleculares a temperaturas pequeñas: colisiones $\text{N}_2:\text{N}_2$ como sistema de referencia	141
8	Las tasas de transferencia colisional	143
8.1.	Tipos de colisiones	143
8.2.	La ecuación de Boltzmann	144
8.3.	Formulación cuántica de la ecuación de Boltzmann	145
8.4.	El potencial intermolecular y las secciones eficaces de colisión	146
8.5.	La ecuación maestra	147
8.6.	Antecedentes de la determinación de las tasas de transferencia colisional	148
8.6.1.	Métodos y técnicas	148
8.6.1.1.	Los métodos acústicos	149
8.6.1.2.	Los métodos espectroscópicos	149
8.6.1.3.	Haces moleculares	151
8.6.2.	Investigaciones anteriores	151
8.6.3.	Resumen y conclusiones	153
9	Expansiones supersónicas	155
9.1.	Estructura y propiedades físicas de las expansiones supersónicas	155
9.1.1.	La zona de silencio	155
9.1.2.	El disco de Mach y la onda de choque lateral	158
9.1.3.	Influencia de la geometría de la tobera en la expansión	158
9.2.	Teoría clásica de las expansiones supersónicas	158
9.3.	Rotura de equilibrio termodinámico en la zona de silencio	159
9.4.	La relajación rotacional y la expansiones supersónicas	159
9.5.	El papel de las transiciones radiativas en las expansiones de gas molecular	161
10	Espectroscopía Raman, dispositivo experimental y metodología	163
10.1.	La espectroscopía Raman lineal como método experimental	163

10.1.1. Introducción al efecto Raman	164
10.1.1.1. La aproximación de polarizabilidad	165
10.1.2. Aplicación de la teoría al N_2	166
10.2. Montaje experimental	167
10.2.1. Descripción de los elementos del montaje	167
10.2.2. Alineamiento de los sistemas ópticos	172
10.3. Procedimiento metodológico	173
10.3.1. Muestreo de la expansión	173
10.3.2. Toma de datos	175
10.3.2.1. Parámetros importantes en el registro de los espectros	175
10.3.2.2. Optimizado del dispositivo experimental	176
10.3.2.3. Descripción de una sesión experimental genérica	177
10.3.3. Reducción de los datos experimentales	179
10.3.3.1. Normalización de las poblaciones rotacionales	179
10.3.3.2. Determinación de las temperaturas rotacionales, sus incertidumbres y su ajuste	180
10.3.3.3. Las poblaciones y sus derivadas	181
10.3.3.4. Densidades relativas	185
10.3.3.5. Determinación de las densidades absolutas	185
10.3.3.6. Escalado de los perfiles de densidad relativa y absoluta, y ajuste del perfil de densidades	186
10.3.3.7. Temperatura traslacional	186
10.3.3.8. Velocidad de expansión	187
10.3.3.9. Aplicación a la Ecuación Maestra	187
10.3.3.10. Determinación de las derivadas temporales de las poblaciones con el código MEQNEW	189
10.4. Problemas experimentales detectados	190
11 Resultados	191
11.1. Condiciones generales de las expansiones realizadas	191
11.2. Poblaciones y temperatura rotacional	191
11.2.1. Espectros rotacionales e intensidades	191
11.2.2. Temperatura rotacional	194
11.2.3. Poblaciones rotacionales	196
11.3. Densidades relativa y absoluta	197
11.3.1. Densidad relativa	197
11.3.2. Densidad absoluta	199
11.4. Otras magnitudes derivadas	202
11.4.1. Temperatura traslacional y rotura de equilibrio	202
11.4.2. Velocidad de expansión	203
11.4.3. Las derivadas temporales de las poblaciones	204
11.5. Tasas de transferencia y secciones eficaces	205
11.5.1. Las tasas de transferencia calculadas y los datos experimentales	206
11.5.2. Estudio individual de las tasas de transferencia	210
11.5.2.1. Errores de las derivadas temporales de las poblaciones y de las tasas $k_{\mu\nu\rightarrow\rho\sigma}^{\text{down,es}}$	216
12 Resumen, conclusiones finales y perspectivas	219
Bibliografía	221
Publicaciones	235

III Apéndices	237
A Desarrollos matemáticos sobre las envolturas internas...	239
A.1. Ecuación del transporte radiativo	239
A.2. Solución de la ecuación de transporte	240
A.3. Intensidad de línea fuera de ETL	241
A.4. Cálculo del flujo observado	243
A.5. Sección eficaz de absorción de un grano de polvo	245
A.6. Perfil de temperatura del polvo	245
A.7. Expresión de la densidad de granos de polvo	246
A.8. Absorción de granos de polvo pequeños	247
A.9. Momento dipolar vibracional	248
A.10. Similitud entre un arco y un anillo	249
B Desarrollos matemáticos sobre las tasas de transferencia colisional...	253
B.1. Temperatura traslacional de un gas en régimen isentrópico ($T_t \lesssim 300$ K)	253
B.2. La Ecuación de Waldmann-Snider y la Ecuación Maestra	254
B.3. Relación tasas de transferencia-sección eficaz de colisión	257
B.4. Tasas de transferencia calculadas, $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$	258
B.5. Tasas de transferencia escaladas experimentalmente, $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,es}}$	261
C Espectros teóricos de CH₂CHCN, CH₃CCH, CH₂CN y H₂CS	265
C.1. Introducción	265
C.1.1. Metodología	266
C.2. El Hamiltoniano reducido de Watson	267
C.2.1. Estructura hiperfina	268
C.3. Método de ajuste	269
C.3.1. Moléculas simétricas	269
C.3.2. Moléculas asimétricas	269
C.4. Resultados	269
C.4.1. CH ₃ CCH	270
C.4.2. H ₂ CS	272
C.4.3. CH ₂ CHCN	275
C.4.4. CH ₂ CN	278
C.5. Conclusiones	281
D Cuaderno de laboratorio	283
D.1. Expansión de 2000 mbar	283
D.2. Expansión de 1000 mbar	295
D.3. Expansión de 500 mbar	307
D.4. Expansión de 200 mbar	315

Índice de figuras

1.1. Evolución de una estrella de $5 M_{\odot}$ al salir de la MS	5
1.2. Diagrama H-R color-color para 47 Tucanae (NGC 104)	6
1.3. Evolución estelar dependiendo de la masa inicial	7
1.4. Densidad y velocidad de expansión en una atmósfera pulsante.	10
1.5. Fuentes de calentamiento y enfriamiento en una estrella oxigenada	13
1.6. Estructura en capas de la envoltura de polvo de IRC+10216	15
1.7. Perfiles de densidad y temperatura en IRC+10216	16
1.8. Destrucción molecular en la zona externa de IRC+10216	17
1.9. Perfil de velocidades del gas en IRC+10216	23
1.10. Interferometría de IRC+10216 a través de la línea $J = 14 - 13$ del CS	24
1.11. Interferometría de IRC+10216 a través de la línea $J = 5 - 4$ del SiO	25
1.12. Abundancias moleculares de IRC+10216	26
1.13. Continuo de IRC+10216	27
1.14. Visión esquemática a gran escala de la envoltura de polvo de IRC+10216	28
1.15. Perfil de intensidad de la envoltura de polvo de IRC+10216	29
1.16. Observaciones interferométricas del continuo de IRC+10216	29
1.17. Observaciones interferométricas de CRL618	30
1.18. Visión esquemática de la estructura de CRL618	31
1.19. Lóbulos de CRL618	32
1.20. Espectro infrarrojo de CRL618	32
1.21. Espectro de radiofrecuencias de CRL618	33
2.1. Modos de vibración del C_2H_2 e isotopómeros	36
2.2. Niveles vibracionales del acetileno	37
2.3. Niveles rotacionales del C_2H_2	40
2.4. Modos de vibración del HCN y sus isotopómeros	47
2.5. Niveles vibracionales del cianuro de hidrógeno	48
3.1. Comportamiento de la luz en un gas	52
3.2. Discretización de la envoltura	61
3.3. Constantes ópticas del carbono amorfo y el SiC amorfo	68
3.4. Esquema de la discretización de la envoltura de IRC+10216	71
3.5. Vista de una estrella AGB a través de la rendija del monocromador	73
3.6. Equivalencia nódulo-anillo	75
3.7. Estimación de la emisión molecular de un nódulo	77
4.1. Espectro observado de IRC+10216 en el intervalo $720-744 \text{ cm}^{-1}$	81
4.2. Espectro observado de IRC+10216 en el intervalo $744-768 \text{ cm}^{-1}$	82
4.3. Espectro observado de IRC+10216 en el intervalo $768-792 \text{ cm}^{-1}$	83
4.4. Espectro observado de IRC+10216 en el intervalo $792-816 \text{ cm}^{-1}$	84
4.5. Espectro observado de IRC+10216 en el intervalo $816-840 \text{ cm}^{-1}$	85
4.6. Espectro observado de IRC+10216 en el intervalo $840-864 \text{ cm}^{-1}$	86
4.7. Condiciones físicas en la CSE de IRC+10216	88

4.8. Profundidad óptica por unidad de longitud para varias líneas del C_2H_2	89
4.9. Ajustes de las líneas seleccionadas de C_2H_2	92
4.10. Efecto de la velocidad de microturbulencia en los ajustes	94
4.11. Temperatura rotacional para algunos niveles del C_2H_2 y del HCN	96
4.12. Las poblaciones, P , de los estados vibracionales del C_2H_2	98
4.13. Temperaturas cinética y de excitación vibracional para las transiciones observadas del C_2H_2	99
4.14. Temperaturas cinética y de excitación vibracional para las transiciones observadas del $H^{13}CCH$	103
4.15. Ajustes de algunas líneas de HCN	105
4.16. Temperaturas cinética y de excitación vibracional para las transiciones observadas del HCN	107
4.17. Magnitudes físicas en la CSE	109
5.1. Observaciones milimétricas y en el infrarrojo medio de IRC+10216	116
5.2. Perfiles de línea del HCN en el rango milimétrico	117
5.3. Estructura de IRC+10216 en forma de capas	119
5.4. Estructura de IRC+10216 en forma de nódulos	119
5.5. Mecanismo de bombeo para los máseres M_2 y M_3	122
5.6. Mecanismo de bombeo para los máseres M_1	122
6.1. Espectro de CRL618 observado y modelo entre 778.4 y 783.6 cm^{-1}	126
6.2. Continuo de CRL618 (SWS/ISO) y ajuste entre 6 y $45\text{ }\mu\text{m}$	128
6.3. Densidades y temperaturas del gas y el polvo en el torno de CRL618	130
6.4.	131
9.1. Mapas de una expansión supersónica genérica	156
9.2. Temperaturas en las expansiones de gases atómicos y moleculares	160
9.3. Velocidades de expansión de gases atómicos y moleculares	161
10.1. Esquema de la dispersión Raman cuántica	165
10.2. Esquema del montaje experimental en planta y visión panorámica	168
10.3. Estimación de la región de muestreo	174
10.4. Muestreo de la expansión y semialtura de la región de muestreo	175
10.5. Centrado de la tobera en el eje y	177
10.6. Ejemplo de <i>plot</i> de Boltzmann de una expansión	180
10.7. Comparación entre las poblaciones experimentales, teóricas y derivadas del ajuste puntual	183
11.1. Espectros rotacionales registrados en la expansión de 2000 mbar	192
11.2. Ajustes de la temperatura rotacional	194
11.3. Poblaciones a lo largo de la expansión	196
11.4. Espectros rovibracionales de la rama $Q\ v = 1 \leftarrow 0$ registrados en la expansión de 2000 mbar	198
11.5. Densidades absolutas	201
11.6. Temperatura traslacional y rotura de equilibrio	203
11.7. Velocidades de expansión	204
11.8. Derivadas temporales de las poblaciones	205
11.9. Secciones eficaces de colisión del N_2	206
11.10 Factor de escala de las tasas de transferencia	207
11.11 Derivadas temporales de las poblaciones escaladas	210
11.12 Espectros colisionales del N_2 (200 mbar)	212
11.13 Espectro colisional del N_2 (500 mbar)	213
11.14 Espectro colisional del N_2 (1000 mbar)	214

11.15 Espectro colisional del N_2 (2000 mbar)	215
C.1. Desviación relativa del ajuste del CH_3CCH	270
C.2. Estudio de estabilidad de las frecuencias calculadas (CH_3CCH)	272
C.3. Desviación relativa del ajuste del H_2CS	273
C.4. Estudio de estabilidad de las frecuencias calculadas (H_2CS)	274
C.5. Desviación relativa del ajuste del CH_2CHCN	276
C.6. Estudio de estabilidad de las frecuencias calculadas (CH_2CHCN)	276
C.7. Desviación relativa del ajuste del CH_2CN	278
C.8. Estudio de estabilidad de las frecuencias calculadas (CH_2CN)	280

Índice de tablas

2.1. Degeneraciones nucleares dependiendo de las simetrías de los niveles rovib- cionales	42
2.2. Momentos dipolares de las transiciones vibracionales del C_2H_2 y HCN	45
4.1. Líneas del C_2H_2 , $H^{13}CCH$, HCN y $H^{13}CN$ identificadas y modeladas	87
4.2. Temperaturas rotacionales <i>ad hoc</i> del C_2H_2 y HCN	96
4.3. Temperaturas vibracionales del C_2H_2	99
4.4. Temperaturas vibracionales del $H^{13}CCH$	103
4.5. Temperaturas vibracionales del HCN y $H^{13}CN$	106
4.6. Errores	110
5.1. Solapamientos en el infrarrojo medio del SiS con C_2H_2 , HCN y sus isotopómeros más abundantes	121
6.1. Parámetros derivados	129
11.1. Condiciones experimentales de las expansiones de N_2	193
11.2. Intensidades integradas de líneas rotacionales	193
11.3. Parámetros de ajuste de la temperatura rotacional	195
11.4. Intensidades integradas de la rama Q	197
11.5. Densidad absoluta: intensidades de la rama Q	199
11.6. Densidades absolutas	200
11.7. Factores de escala de la densidad absoluta	200
11.8. Parámetros de los ajustes de las densidades	202
11.9. Factor de escala promedio	209
C.1. Constantes espectroscópicas del CH_3CCH	271
C.2. Constantes espectroscópicas del H_2CS	274
C.3. Constantes espectroscópicas A , B y C del CH_2CHCN calculadas por métodos <i>ab initio</i>	275
C.4. Constantes espectroscópicas del CH_2CHCN	277
C.5. Constantes espectroscópicas del CH_2CN	279
C.6. Frecuencias ajustadas de CH_3CCH , H_2CS , CH_2CHCN y CH_2CN	282

Lista de abreviaturas y siglas

AGB.-	A symptotic G iant B ranch
ALI.-	A ccelerated (A pproximate) L ambda I teration M ethod
ALMA.-	A tacama L arge M illimeter A rray
APEX.-	A tacama P athfinder E Xperiment
CARS.-	C oherent A nti- S tokes R aman S pectroscopy
CC.-	C lose C oupling M ethod
CCD.-	C harge- C oupled D evice
CS.-	C loupled S tates M ethod
CSE.-	C ircumstellar E nvelope
CSIC.-	C onsejo S uperior de I nvestigaciones C ientíficas
CSO.-	C altech S ubmillimeter O bservatory
DAMIR.-	D pto. A strofísica M olecular e I nfra R oja
EBF.-	E lectron B eam F luorescence
ECS.-	E nergy C orrected S udden F ormalism
ECS-E.-	E nergy C orrected S udden E xponential S caling L aw
ETL.-	E quilibrio T ermodinámico L ocal
GBT.-	G reen B ank T elescope
IOS.-	I nfinite O rder S udden A pproximation
IR.-	I nfra R ed R adiation
IRAM.-	I nstitut de R adio A stronomie M illimetrique
IRS.-	I nverse R aman S pectroscopy
IRTF.-	I nfrared T elescope F acility
ISM.-	I nterstellar M edium
ISO.-	I nfrared S pace O bservatory
JCMT.-	J ames C lerk M axwell T elescope
LIF.-	L aser I nduced F luorescence

LSR.–	Local Standard of Rest
LVG.–	Large Velocity Gradient Method
LWS.–	Long Wavelength Spectrometer
MEQ.–	Master Equation
MIR.–	Mid InfraRed Radiation
MPIfR.–	Max Planck Institut für Radioastronomie
MS.–	Main Sequence
NRAO.–	National Radio Astronomy Observatory
NIR.–	Near InfraRed Radiation
PAH.–	Polycyclic Aromatic Hydrocarbon
PN(e).–	Planetary Nebula(e)
PPN(e).–	Proto-Planetary Nebula(e)
PSS.–	Perturbed Stationary States Approach
REMPI.–	Resonance Enhanced MultiPhoton Ionization
RMEQ.–	Rewritten Master Equation
RS.–	Raman Spectroscopy
SCS.–	Semiclassical Centrifugal Sudden Aproximation
SMA.–	SubMillimeter Array
SOFIA.–	Stratospheric Observatory For Infrared Astronomy
SRGS.–	Stimulated Raman Gain Spectroscopy
SRS.–	Stimulated Raman Spectroscopy
SWS.–	Short Wavelength Spectrometer
TEXES.–	Texas Echelon-cross-Echelle Spectrograph
VLA.–	Very Large Array
WS.–	Ecuación de Waldmann-Snider

Parte I

Las regiones internas de las envolturas de las estrellas evolucionadas

Capítulo 1

Estrellas AGB y PPNe

1.1. Introducción a las estrellas de tipo AGB y post-AGB

En la evolución de una estrella, las etapas más complejas y ricas en fenómenos físicos y químicos se dan, sin duda alguna, al salir de la Secuencia Principal. Cambios estructurales profundos encaminan a la estrella al final de su evolución, no sin antes contribuir decisivamente al enriquecimiento y, por tanto, a la propia evolución de su entorno en la Galaxia (y lo más probable que también ocurra lo mismo en el resto de las galaxias). En ese sentido y como veremos más adelante, la eyección de materia por parte de las estrellas evolucionadas desempeña un papel fundamental en el aumento de la metalicidad del gas que dará lugar a una nueva generación de estrellas. Sin embargo, las estrellas viejas no sólo contribuyen con la aportación de nuevos elementos procesados en su núcleo, sino que también generan gran cantidad de polvo y moléculas simples y complejas. La mayor parte de las moléculas en fase gaseosa acaban siendo destruidas por el campo de radiación UV Galáctico. No obstante, no ocurre así con los granos de polvo que, aunque sí sufren los rigores del espacio interestelar, no son totalmente destruidos llevando consigo parte de las especies químicas generadas en las envolturas circunestelares donde fueron creados. Posteriormente, una serie de procesos químicos no entendidos todavía al completo, permiten la síntesis de nuevas especies moleculares cada vez más complejas como pueden ser la acetona ($(\text{CH}_3)_2\text{CO}$, [Combes et al., 1987](#)), el glicoaldehído (CH_2OHCHO , [Hollis et al., 2000](#)) o la acetamida (CH_3CONH_2 , [Hollis et al., 2006](#)), tanto en fase gaseosa como en la superficie de los granos. Los efectos de la generación de polvo en las *envolturas circunestelares* (CSEs) son tan importantes que se sabe que muchos de los núcleos de condensación de los granos de polvo que se pueden encontrar en el Sistema Solar fueron generados en la eyección de materia de estrellas AGB. Así pues, es muy probable que la evolución del Sistema Solar comenzara con un aporte inicial significativo de especies moleculares complejas. En conclusión, la evolución tardía de las estrellas de masas intermedias se erige como uno de los pilares fundamentales de la evolución de la Galaxia.

En esta Sección expondremos la evolución de una estrella de masa intermedia ($5 M_\odot$) para saber en qué etapas se encuentran IRC+10216 y CRL618. Posteriormente, hablaremos con más profundidad de la eyección de materia en las estrellas AGB. Estudiaremos los mecanismos físicos que propician esta expulsión y la química que se da en las regiones que rodean a la estrella, relacionada profundamente con las condiciones físicas del medio. La mayor parte de la información incluida en esta Sección ha sido tomada de [Iben \(1967\)](#); [Iben & Renzini \(1983\)](#); [Clayton \(1968\)](#); [Bowers & Deeming \(1984\)](#); [Böhm-Vitense \(1992\)](#).

1.1.1. Evolución de una estrella de $5 M_\odot$

La vida de una estrella puede ser dividida en tres partes diferenciadas: su nacimiento, su vida *estacionaria* y las últimas fases de su evolución. En un diagrama H-R estos tres

periodos ocupan ciertas regiones bien delimitadas: a partir de una nube de gas se crea una protoestrella que se mueve a lo largo de la *traza de Hayashi* hasta llegar a la *Secuencia Principal* (MS), donde pasa la mayor parte de su vida y mantiene un comportamiento estacionario. Al cabo de $\sim 10^{10}$ años esa estrella sale de la Secuencia Principal para sufrir las transformaciones correspondientes a las últimas etapas de su evolución (Figura 1.1).

Durante el tiempo que la estrella permanece en la MS, el H existente en el centro de su núcleo convectivo (la región más caliente) se va transformando paulatinamente en He gracias al ciclo CN¹. Conforme la cantidad de He aumenta en el núcleo (entre los puntos 1 y 2), la densidad de partículas decrece. El tamaño del núcleo se reduce debido a que la energía interna de éste es menor que su energía gravitatoria. Como consecuencia, aumenta la temperatura nuclear y el ritmo de producción de energía se hace mayor, incrementándose a su vez la presión de radiación sobre las diferentes capas de la estrella. Así pues, aumentan el radio estelar y la luminosidad reduciéndose la temperatura superficial. Este proceso se mantiene mientras la abundancia de H sea suficiente como para mantenerlo. Después, la producción de energía comienza a reducirse y el núcleo se contrae para tratar de mantener esta producción de energía contrayéndose ligeramente toda la estrella. Cerca del punto 3, la fracción másica de H en el núcleo es tan sólo del 1 %. Las estrellas con más de $1.25 M_{\odot}$, poseedoras de una capa convectiva en el núcleo, la van perdiendo paulatinamente (puntos 1–2 de la Figura 1.1, $T_{1-2} \sim 5 \times 10^7 - 5 \times 10^8$ años), desapareciendo completamente al llegar al punto 3 ($T_{2-3} \sim 10^6 - 10^7$ años). Entre los puntos 3 y 5 la máxima producción de energía por el ciclo CN se traslada a capas más externas, donde el H es abundante ($T_{3-5} \sim 10^6 - 10^7$ años). Mientras, la materia procesada se une al núcleo central (inactivo), que sigue contrayéndose por su propia gravedad, cada vez más rápidamente. Esta compresión nuclear hace que la generación de energía en la capa activa aumente considerablemente, expandiendo la atmósfera estelar. La luminosidad decrece porque la mayor parte de la energía generada en la capa activa se invierte en incrementar el radio de la estrella. Este decrecimiento de luminosidad se traduce en un descenso de la temperatura efectiva de la estrella. Durante este proceso, la anchura de la capa activa va decreciendo y la producción de energía se reduce igualmente. En este punto, el núcleo estelar alcanza densidades de $\sim 10^5 \text{ g cm}^{-3}$ y está formado principalmente por He y N, pudiéndose encontrar C y O en menores proporciones. Cerca del punto 6 aparece una capa convectiva que se va expandiendo desde la superficie hacia dentro de la estrella ($T_{5-6} \sim 5 \times 10^5 - 5 \times 10^6$ años). Entre los puntos 6 y 7 esta capa sigue aumentando de grosor llegando a tener un radio interno de $\simeq 0.3 R_{*}$. Esta capa mezcla el material estelar homogeneizando el medio y sacando especies procesadas hacia la superficie en un proceso que podríamos llamar el *primer dragado*. Los efectos de este fenómeno son una reducción sustancial de las abundancias de Li, Be y B; un decrecimiento de la abundancia de C en un 30 %, aproximadamente; un descenso de la razón $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ de 90 a 20–30 y un incremento de la abundancia de N. La abundancia de O sufre muy pocas variaciones pudiéndose considerar constante. El transporte de energía por convección resulta ser más eficiente que por difusión y aumenta la luminosidad y ligeramente el radio, reduciéndose aún más la temperatura superficial. En el diagrama H-R esta región se llama la *rama de las gigantes* (RGB). Al empezar a subir por esta rama, la estrella comienza a eyectar materia con ritmos de $\sim 10^{-9} M_{\odot}/\text{año}$.

En las estrellas de entre 0.5 y $3 M_{\odot}$, antes de que en el núcleo se alcance la temperatura necesaria para la ignición del He, los electrones quedan degenerados por la gran presión existente en el núcleo, pasando a seguir una función de estado prácticamente independiente de la temperatura. Posteriormente, debido al proceso de contracción del núcleo, el ^4He comienza a transformarse en ^{12}C por medio de la *reacción triple alfa*². La generación de esta energía calienta el núcleo aumentando considerablemente el ritmo de fusión del ^4He . Sin

¹El ciclo CN consiste en el conjunto de reacciones nucleares $^{12}\text{C}(\text{H},\gamma)^{13}\text{N}(\text{e}^{+},\nu_{\text{e}})^{13}\text{C}(\text{H},\gamma)^{14}\text{N}(\text{H},\gamma)^{15}\text{O}(\text{e}^{+},\nu_{\text{e}})^{15}\text{N}(\text{H},^4\text{He})^{12}\text{C}$. Cuando la estrella es poco masiva, se cree que la reacción dominante es la cadena protón-protón: $\text{H}(\text{H},\text{e}^{+}\nu_{\text{e}})\text{D}(\text{H},\gamma)^3\text{He}(^3\text{He},2\text{p})^4\text{He}$.

²La reacción es $^4\text{He}(^4\text{He},\gamma)^8\text{Be}(^4\text{He},\gamma)^{12}\text{C}$.

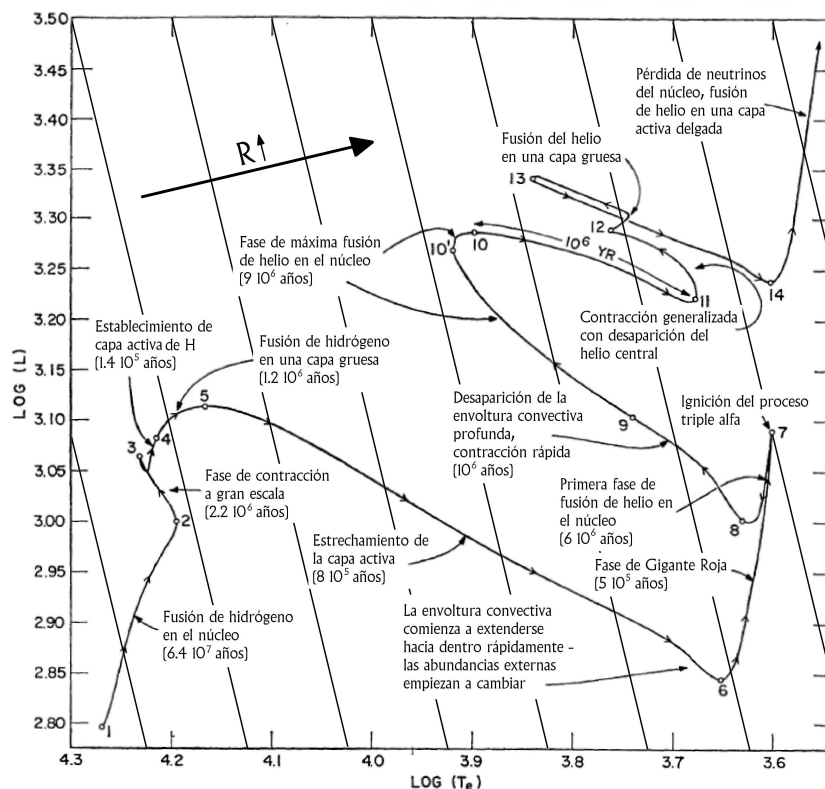


FIGURA 1.1.— Evolución de una estrella de $5 M_{\odot}$ al salir de la MS. Las líneas oblicuas indican las regiones geométricas del diagrama en las que las estrellas tienen radio constante. Las estrellas de menor masa no presentan la zona entre el punto 2 y el punto medio entre el 5 y el 6, pasando directamente de uno a otro. La diferencia se debe a la falta de núcleo convectivo en estrellas de masas similares a las solares (Figura tomada de [Iben, 1967](#)).

embargo, el núcleo no es capaz de contrarrestar este incremento de temperatura expandiéndose, puesto que en este momento la presión en el núcleo es básicamente la electrónica y depende muy ligeramente de la temperatura. La temperatura sigue aumentando rápidamente hasta que, finalmente, se rompe la degeneración electrónica y el núcleo se expande. A este fenómeno se le llama el *flash de He*. La luminosidad generada por el núcleo, obtenida por medio de los modelos numéricos, es extremadamente grande ($\sim 10^{11} L_{\odot}$). Este proceso es muy rápido, del orden de segundos. Después el núcleo se reajusta para fusionar He de manera estable.

Al comenzar la fusión del He la estrella baja por la rama hasta quedar situada en la zona media ($T \simeq 7 \times 10^7$ años) siendo visible esta acumulación observacionalmente (Figura 1.2). La región de fusión del ${}^4\text{He}$ en el diagrama H-R está situada entre los puntos 7 y 10 de la Figura 1.1. Durante ese trayecto la mayor fuente de energía sigue siendo la fusión del H con una contribución del 85 % de la energía total. Al fusionarse el ${}^4\text{He}$ del núcleo central, expande sus capas más externas moviendo hacia el exterior la capa activa en la que se fusiona el H. Por ello, la atmósfera estelar se contrae. Aparece una capa convectiva en el centro del núcleo que crece según la estrella evolucione hacia el punto 10. El ${}^{12}\text{C}$ reacciona con ${}^4\text{He}$ para dar lugar a ${}^{16}\text{O}$. Igualmente, también es generado el ${}^{22}\text{Ne}$. Antes de llegar al punto 10, la fracción de la energía generada en la estrella por medio de la fusión del ${}^4\text{He}$ es del 35 % de la generada por la fusión del H. La abundancia de ${}^4\text{He}$ en el núcleo central comienza a decaer cerca del punto 10' y se reduce el ritmo de generación de energía,

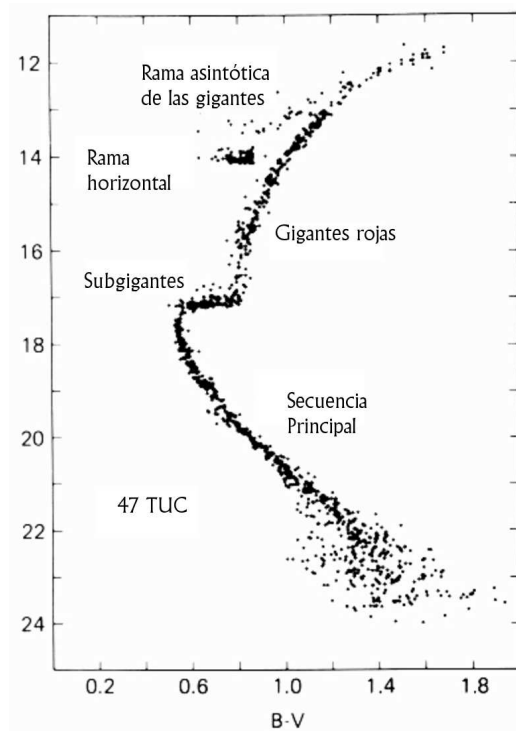


FIGURA 1.2.— Diagrama H-R color-color para 47 Tucanae (NGC 104). Se puede apreciar claramente la Secuencia Principal, la rama de las subgigantes, la rama de las gigantes, la rama horizontal y la rama asintótica de las gigantes (Figura tomada de Böhm-Vitense, 1992, pág. 9).

contrayéndose el núcleo y expandiéndose la estrella de nuevo. Entre los puntos 11 y 14, el comportamiento de la estrella es similar que entre los puntos 2 y 6. Cuando se ha acabado el ^4He del núcleo central, el gas de electrones queda degenerado. Por otra parte, aparece el llamado *segundo dragado*, por el que se incrementa de manera importante la abundancia de ^4He en la superficie y disminuyen las abundancias de ^{12}C y ^{16}O , aumentando la de ^{14}N . El comportamiento a partir del punto 8 depende de la masa de la estrella. Si $M_* = 3 M_\odot$, el recorrido entre los puntos 11 y 14 no existe (Figura 1.3). En cualquier caso, la estrella se acerca a la rama de las gigantes a lo largo de la llamada *rama asintótica de las gigantes* (AGB), aunque esta vez eyectando mucha más materia al *medio interestelar* o ISM ($\lesssim 10^{-4} M_\odot/\text{año}$), y permanece ahí durante un tiempo significativamente más corto que en la RGB. Durante el periodo de tiempo que las estrellas con masas mayores que $2 M_\odot$ pasan en la rama AGB, sufren un *tercer dragado* en el que la capa convectiva que forma la atmósfera estelar consigue llevar a la superficie materia procesada compuesta principalmente por ^{12}C e isótopos de otros elementos enriquecidos con neutrones.

La trayectoria de una estrella en el diagrama H-R depende además de su metalicidad: las estrellas de la población II³ de los cúmulos globulares pobres en metales se acercan a

³La *población I* es el conjunto de estrellas que se suponen formadas a partir de nubes moleculares compuestas por material procesado, rico en metales. Las estrellas de la *población II* son aquellas formadas a partir de gas procesado, pobre en metales. Las de la *población III* serían las estrellas formadas por gas únicamente compuesto por H y He. Las estrellas de la población I son más jóvenes que las de la población II, y ambas más jóvenes que las de la población III, habiéndose formado las de la población I con el gas enriquecido con los materiales procesados por las estrellas desaparecidas de la población II. Las estrellas de los cúmulos globulares han evolucionado más lentamente que sus análogas en el centro Galáctico (ya desaparecidas) y aún están en evolución. Los espectros observados de ambos tipos de estrellas son muy distintos, destacando principalmente una abundancia bastante pequeña de metales en las de la población II con respecto a las de la población I.

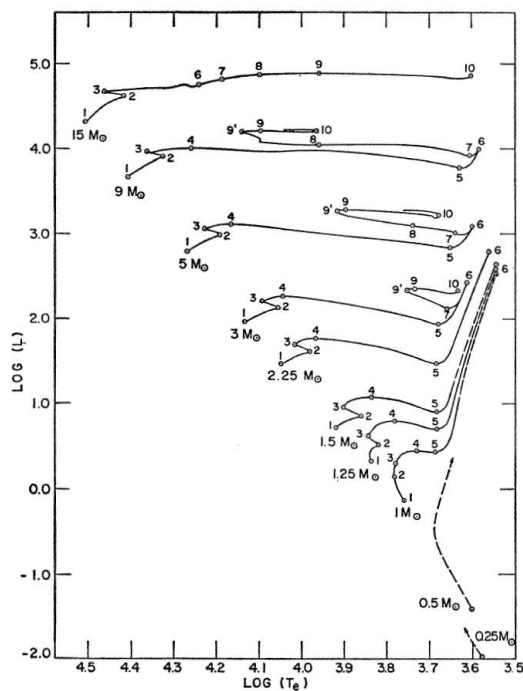


FIGURA 1.3.— Evolución estelar dependiendo de la masa inicial. El comportamiento del núcleo y, por tanto del resto de la estrella a gran escala, depende directamente de las condiciones físicas que se den en el núcleo, relacionadas estrechamente con la masa de la estrella. Así pues, las estrellas poco masivas pueblan primero la RGB y más tarde la AGB y las de masa intermedia pueblan únicamente la rama AGB, mientras que las masivas no pueblan ninguna de las dos (Figura tomada de [Iben, 1967](#)).

la rama de las gigantes por la izquierda (por la rama AGB) mientras que las estrellas de la población I poco masivas entran en la rama de las gigantes directamente y las de masas intermedias entran primero en la RGB y luego en la AGB.

Cuando la estrella ha llegado a la rama AGB, la generación de energía corre a cargo de una capa de ${}^4\text{He}$, habiendo desaparecido la contribución procedente de la fusión del H en una capa más externa. Estas estrellas no pulsan y se dice que están en la etapa E-AGB o *fase AGB temprana*. Hacia el final de la fase E-AGB, una capa muy delgada de H se vuelve a activar dando lugar a lo que se llaman los *pulsos térmicos*, entrando en la fase TP-AGB o *fase AGB de pulsos térmicos*, donde la estrella pulsa. Cuando la estrella entra en la fase TP-AGB, el ${}^4\text{He}$ que hace de frontera con la capa activa de H comienza a fusionarse mediante la reacción tripe alfa. La generación repentina de energía produce una expansión de las capas externas a esa frontera debido a que el gas de electrones no está degenerado. Una vez que la expansión ha evolucionado lo suficientemente, el ${}^4\text{He}$ se apaga. La masa expandida tiende a caer sobre el núcleo y la capa activa de H se enciende de nuevo, manteniéndose la fusión estable durante un tiempo al final del cual se produce otro pulso por el mecanismo anterior. La amplitud de cada pulso, al igual que el tiempo entre pulsos, aumenta con el número de estos hasta que se llega a un valor constante.

Cuando la estrella ha consumido la mayor parte del ${}^4\text{He}$, es expulsada el 50% de su masa por presión de radiación debido a inestabilidades en la fusión de los elementos del núcleo, aunque, en realidad, el proceso de eyección de la atmósfera es todavía desconocido. Una de las teorías actuales indica que puede estar relacionado con el cambio del modo de pulsación, desde el fundamental al primer sobretono, dando lugar al llamado *superviento*. Este fenómeno consistiría en eyecciones intensas discretas que se repetirían cada varias decenas de pulsos térmicos, expulsando la atmósfera estelar en unos 1000 años. Durante la

expulsión de la atmósfera estelar van quedando al descubierto cada vez capas más internas y por lo tanto más calientes, hasta llegar a zonas con temperaturas de unos 30000 K. En ese momento, el campo de radiación emitido por la nueva estrella central (el antiguo núcleo convertido en *enana blanca*) es lo suficientemente energético como para ionizar eficientemente las capas expulsadas y crea una región HII que rodea la estrella. Así, el sistema se convierte en una *nebulosa protoplanetaria (PPN)*. Las enanas blancas son objetos muy calientes (tipos espectrales F, A o B) compuestos principalmente por carbono y oxígeno en un gas de electrones degenerado y con densidades $\sim 10^9 \text{ g cm}^{-3}$. Cuando las capas eyectadas se alejan lo suficientemente de la estrella, la región HII desaparece y el sistema pasa a la fase de *nebulosa planetaria (PN)*, en la que está compuesto por una estrella central muy caliente rodeada por una nebulosa de gas frío con diferentes geometrías.

Las etapas posteriores quedan fuera del tema de este trabajo porque lo que no serán tratadas.

1.1.2. Eyección de materia en las estrellas AGB

Se calcula que entre el 95 % y el 98 % de todas las estrellas que están muriendo actualmente deben poseer una masa intermedia o pequeña. Muchas de ellas darán lugar a estrellas AGB. Estas estrellas, detectadas por vez primera por Deutsch (1956), se caracterizan por tener masas menores de $6 - 8 M_{\odot}$, luminosidades por encima de $3000 L_{\odot}$, una temperatura efectiva pequeña (entre 2000 y 3000 K), grandes dimensiones (su radio aumenta en 2 ó 3 órdenes de magnitud con respecto a la estrella que la dio lugar) y, en consecuencia, porque la fuerza de la gravedad sufrida por las capas externas de sus atmósferas es poco intensa. Los fenómenos físicos producidos por la evolución del núcleo estelar producen efectos no compensados gravitacionalmente y la atmósfera estelar pulsa con periodos de entre 100 y 700 días (e.g., Schöier & Olofsson, 2001) expulsando parte de los materiales que la componen (veremos los mecanismos de eyección en la Sección 1.1.3). Esta pulsación presenta amplitudes de oscilación con Δm_{bol} , Δm_{MIR} , $\Delta m_{\text{NIR}} \leq 3 \text{ mag}$ (Habing, 1996; Le Bertre, 1992, 1993) que pueden ser observadas tanto en el óptico como en el UV (si la envoltura que rodea a la estrella es ópticamente transparente y lo permite) o en el infrarrojo, que es la zona del espectro donde este tipo de estrellas emiten más radiación. Los modelos sugieren que la eyección de materia se produce, en primera aproximación, de manera radial e isotropa a velocidades de entre 10 y 20 km s^{-1} y con ritmos de eyección de $\sim 10^{-8} - 10^{-4} M_{\odot}/\text{año}$ durante periodos de unos 10^5 años (Bujarrabal et al., 1994; Schöier & Olofsson, 2001; Olofsson et al., 2002), frente a las $10^{-15} M_{\odot}$ que una estrella de tipo solar en la MS eyecta en un año (Perrin et al., 2004). Observacionalmente, estudios realizados sobre un gran número de estrellas AGB indican que la mayor parte de ellas pierden materia a ritmos pequeños. (Glassgold, 1996). La densidad y la temperatura en el entorno de estas estrellas son tales que el gas eyectado pasa a ser totalmente molecular, llegando incluso a formarse granos de polvo por condensación de especies refractarias, como pueden ser el carbono amorfo, H_2O , CO_2 , SiC, especies con Ti, Al o Fe y otros tipos de moléculas más complejas como silicatos (ver Sección 1.1.6). La CSE en su fase AGB puede llegar a ser tan opaca como para impedir la detección de la estrella central (ver, por ejemplo, el caso de IRC+10216 en la Figura 1.6). Sin embargo, parece ser que no existe formación de granos de polvo a distancias menores de $\simeq 5 R_*$ (Zuckerman, 1980; Ridgway & Keady, 1988).

En general, todas las estrellas se forman en un entorno con mayor abundancia de oxígeno que de carbono. Eso supone que la probabilidad de que una estrella AGB sea oxigenada es mayor que de que sea carbonada. Sin embargo, dependiendo de los procesos convectivos que se produzcan desde que la estrella entra en la RGB, la cantidad de carbono u oxígeno que es llevado al exterior de la atmósfera estelar desde el núcleo puede hacer cambiar la razón entre las abundancias con respecto a lo esperado. Así, si el cociente $[\text{C}]/[\text{O}] > 1$ la estrella es carbonada; si es $[\text{C}]/[\text{O}] < 1$ la estrella es oxigenada; y si $[\text{C}]/[\text{O}] \simeq 1$ la estrella es de tipo S (Habing, 1996). Según veremos en la Sección 1.1.4, la química de las envolturas de estrellas de tipo C es mucho más rica que las de tipo S u O.

En resumen, parece ser que las estrellas avanzadas en la rama asintótica de las gigantes ya comienzan a mostrar el comportamiento del que, más adelante, serán consecuencia las nebulosas planetarias. Desafortunadamente, a pesar de que el número de estrellas AGB y de PNe detectadas y estudiadas es relativamente grande⁴, es difícil encontrar estrellas que se encuentren entre los estadios de AGB y PNe. Esta carencia de observaciones dificulta el desarrollo de una teoría evolutiva robusta y sugiere que la fase PPN es bastante rápida (~ 1000 años, Volk, 1992), siendo muy pocas las estrellas que se encuentran actualmente en ella. Las PPNe tienen características similares a las estrellas AGB pero con la presencia adicional de chorros bipolares de alta velocidad (Cernicharo et al., 1989), una región HII ultracompacta que rodea a la estrella central (el núcleo de la antigua estrella) y una PDR en la frontera entre la región HII y la nube molecular circunestelar, que envuelve todo el sistema.

1.1.3. Velocidad de expansión

Gracias a diferentes estudios realizados desde los años 50 se sabe que la velocidad de expansión terminal de la materia estelar expulsada por una estrella AGB alcanza valores de entre 5 y 25 km s⁻¹ (Herpin et al., 2002), que son velocidades similares a la velocidad de escape en la superficie de la estrella (Pijpers & Hearn, 1989a). Las actuales teorías aceptadas sugieren que *la presión de la radiación emitida por la estrella sobre el polvo es la principal causante de la aceleración* a la que está sometido el gas (ver Sección 1.1.3.2).

Sin embargo, esta consideración falla al estudiar las zonas internas donde el polvo aún no se ha formado: la temperatura cinética del gas cerca de la estrella es demasiado alta como para que aparezcan granos de polvo lo suficientemente grandes. Sin embargo, se piensa que el SiC o los compuestos de titanio, aluminio o hierro, pueden condensar incluso en la fotosfera estelar dando lugar a granos de polvo muy pequeños. Estos granos diminutos sirven como centro de condensación a mayores distancias para otras especies moleculares, pero no son capaces de acelerar el gas que les rodea. Entonces, ¿cómo llega el gas hasta las zonas en las que los granos crecen lo suficiente como para acelerarlo?

1.1.3.1. Aceleración por pulsación

La respuesta a esta pregunta, hasta el momento, se basa en la consideración de dos fenómenos físicos asociados a la pulsación estelar. Son *la propagación de ondas de sonido* y *la propagación de ondas de choque* desde la superficie de la estrella.

Ondas de sonido

Parker (1958) propone una teoría simplificada de la propagación de ondas de sonido a partir de la fotosfera del Sol. Pijpers & Hearn (1989a) y Pijpers & Habing (1989b) retoman la teoría haciendo un estudio más profundo mediante el uso de ondas sonoras lineales y monocromáticas sin tener en cuenta la creación de polvo en la envoltura.

Los resultados demuestran que es posible explicar el flujo de masa eyectada a partir tan sólo de la existencia de ondas sonoras con periodos menores de 10 días y longitudes de disipación del orden de 1 R_{*}. Mediante este tipo de ondas se consigue aumentar de manera importante la densidad a varios radios estelares con respecto a los modelos estelares no pulsantes y se generan vientos con velocidades similares a las observadas y ritmos de pérdida de masa físicamente aceptables.

A pesar de no considerar la formación de granos de polvo, el mecanismo parece viable y propone la expansión de la fotosfera de la estrella hasta grandes distancias, donde los materiales refractarios pueden condensar y así, iniciarse el mecanismo de aceleración por presión de radiación sobre los granos de polvo.

⁴Gran parte de las estrellas en las últimas fases de su evolución son estrellas AGB y se estima que aparece una nebulosa planetaria cada año (Habing, 1996).

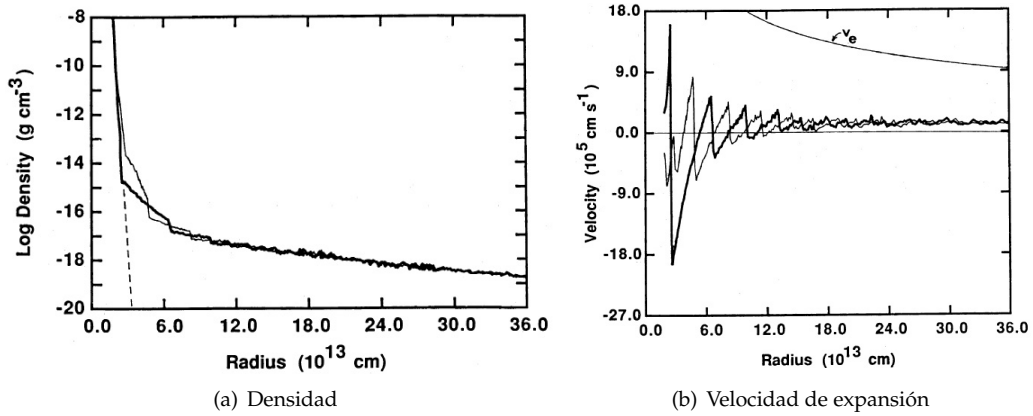


FIGURA 1.4.— Densidad y velocidad de expansión en una atmósfera pulsante. (a) La curva discontinua representa la densidad de una atmósfera no pulsante, la continua gruesa representa la densidad en la fase 0.0 mientras que la curva continua delgada es la densidad en fase 0.5. Se ve claramente la expansión que sufre la atmósfera debida a las ondas de choque generadas en la pulsación estelar en el modo radial fundamental. (b) Considerando la pulsación y no teniendo en cuenta el polvo. La línea gruesa representa la velocidad del gas eyectado en la fase 0.0 mientras que la delgada representa lo mismo pero en la fase 0.5. Estos resultados muestran que no es necesaria la existencia del polvo para explicar la eyección de materia aunque los valores obtenidos sólo se ajustan a los datos observacionales para pérdidas de masa pequeñas (Figuras tomadas de [Bowen, 1988](#)).

Ondas de choque

El otro mecanismo, que hasta ahora se ha considerado como complementario a la aceleración por presión de radiación sobre granos, es la aparición de ondas de choque generadas por la pulsación estelar. [Bowen \(1988\)](#) lo estudia en profundidad, aplicándolo al fenómeno de la pérdida de masa, considerando tanto la pulsación radial simple como el primer sobretono. Los resultados son distintos para ambos casos pero sus consecuencias son las mismas: una expansión de la atmósfera estelar y la generación de un viento capaz de eyectar materia al ISM, aún sin contar con el polvo. Aún así, el autor introduce la generación de polvo en su modelo para estudiar cómo influye éste en la eyección de materia. En la Figura 1.4(a) se puede ver el efecto de los frentes de onda generados en la pulsación estelar sobre la densidad de materia.

Debido a la acción de la pulsación sobre los elementos de volumen de la zona externa de la envoltura, estos son expulsados hacia el medio interestelar. Después de la acción del frente sobre esos elementos de volumen, su trayectoria se vuelve balística, respondiendo únicamente a la acción de la gravedad, al gradiente de presiones y al momento cedido por los granos de polvo, en el caso de ser lo suficientemente importante. Los elementos que se encuentran con otro frente antes de llegar a su posición original repiten el proceso siendo desplazados hacia el exterior de la CSE en promedio y aumentando la densidad en las zonas “externas” a la estrella (ver Figuras 1.4(a) y (b)).

1.1.3.2. Aceleración por presión de radiación

[Gilman \(1972\)](#) demuestra mediante un planteamiento sencillo que el polvo puede ceder la suficiente energía al gas y la transmisión del momento lineal entre ellos es suficientemente eficiente como para alcanzar las velocidades observadas. Poco después, [Kwok \(1975\)](#)

trata el tema planteando un modelo teórico que predice un incremento complejo de la velocidad del gas producido por el acoplamiento dinámico entre éste y los granos de polvo. Según esta teoría, el gas de una CSE se puede considerar como un fluido con una cierta viscosidad a las escalas a las que el gas es acelerado. Así pues, la fricción sufrida por los granos de polvo a moverse en un medio viscoso con una densidad de gas relativamente grande, como es el caso de la CSE interna, sería la encargada de transmitir al gas la energía recibida de los fotones estelares y acelerarlos hacia el ISM.

La presión de radiación por fotones estelares acelera los granos de polvo formados cerca de la estrella. El acoplamiento dinámico entre el polvo y el gas en las regiones en las que coexisten es efectivo a causa de que la densidad de gas es lo suficientemente grande. En consecuencia, el gas es también acelerado (Gilman, 1972; Kwok, 1975).

1.1.3.3. Proceso de aceleración

La teoría que explica actualmente la eyección de materia estelar y la emisión molecular detectada propone el siguiente proceso:

1. *El gas es eyectado de la estrella hacia el ISM por la pulsación estelar.* Según el modelo estándar actual, la eyección de materia se debe a efectos sónicos y/o de pulsación asociados a las estrellas centrales, alcanzando velocidades de expansión de $2 - 3 \text{ km s}^{-1}$. Dependiendo de si la pulsación se produce en el modo fundamental o en algún sobretono o intervienen ondas sonoras creadas durante la propia pulsación estelar, la eyección será radial o no, aunque puede ser considerada radial en primera aproximación.
2. *Al ser eyectado el gas comienza una química rica basada en el C, en el caso de estrellas carbonadas ($C/O > 1$), o en el O, en el caso de estrellas oxigenadas ($C/O < 1$).* La gran cantidad de metales generados en los núcleos durante los últimos estadios de la evolución estelar, son drenados hasta la superficie por la conversión de gran parte de la atmósfera estelar en una gran capa convectiva (Sección 1.1.1). La eyección de materia desde la superficie de la estrella junto con las densidades grandes y las temperaturas moderadas ($\simeq 2000 - 3000 \text{ K}$), permiten la formación de especies moleculares relativamente sencillas que alcanzan el equilibrio químico (Tsuji, 1973, Sección 1.1.4).
3. *Gracias a la creación de tal cantidad de especies químicas, siendo algunas de ellas refractarias, es decir, susceptibles a la condensación, se forman acumulaciones de estas especies que dan lugar a los núcleos de condensación de los granos de polvo.* En estrellas ricas en C, las especies refractarias más abundantes son el carbono amorfo y el SiC. En estrellas oxigenadas se detectan bandas de SiO y hielos formados por H_2O , CO, CO_2 , H_2CO , CH_4 , etc. Otras moléculas que pueden formar los granos de polvo pueden ser PAHs, como el coroneno ($\text{C}_{24}\text{H}_{12}$), cadenas carbonadas, Al_2O_3 , MgSiO_3 , Mg_2SiO_4 , MgFeSiO_4 y otras moléculas complejas (Draine, 2003). Dependiendo de la abundancia de las especies que formen los granos y puedan condensar, de la densidad y de la temperatura, un grano de polvo crecerá más o menos rápido. Este tema será discutido en más profundidad en la Sección 1.1.6.
4. *Los granos de polvo son acelerados al interactuar con la radiación emitida por la estrella.* El máximo de emisión estelar a las temperaturas efectivas características de las estrellas AGB, se alcanza para la radiación longitudes de onda de aproximadamente igual a $1 \mu\text{m}$. En consecuencia, una gran cantidad de energía es emitida en forma de radiación en el IR medio, el óptico y la zona del UV cercano. En las regiones más internas de la CSE, los granos crecen hasta alcanzar tamaños del orden de $0.1 \mu\text{m}$ (ver Sección 1.1.6), por lo que toda la radiación emitida por la estrella con longitudes de onda menores, puede interactuar con los granos. Parte de los fotones que inciden en estos son absorbidos y parte son dispersados en distintas direcciones. Las secciones eficaces

de absorción y dispersión o “scattering” dan cuenta de dichos procesos. Tanto durante la absorción como en la dispersión, los fotones estelares ceden parte de su energía y momento a los granos con los que interactúan, siendo los granos acelerados, calentados y direccionados hacia el ISM al mismo tiempo. La densidad de granos de polvo es pequeña (entre 3 y 4 órdenes de magnitud menor que la densidad de gas; Dominik et al., 1990; Bergeat & Chevallier, 2005) y su recorrido libre medio grande ($\ell = 1/n_d \pi a^2$, donde n_d es la densidad de granos de polvo y a el radio de un grano esférico genérico), lo que permite que se muevan durante grandes distancias sin colisionar entre ellos. En ese recorrido, únicamente chocan con las moléculas gaseosas transfiriendo de forma eficiente parte del momento ganado por la interacción con la radiación estelar. Esto se produce porque el recorrido libre medio de cada molécula es muy pequeño en comparación con las dimensiones de las regiones circunestelares y el gas puede considerarse como un fluido con una viscosidad suficientemente grande (Gilman, 1972). Por medio del acoplamiento que se produce entre el gas y el polvo, la velocidad adquirida por el gas y la aceleración que éste alcanza en las regiones de formación de polvo están totalmente dominados por la aceleración sufrida por los granos. Conforme estos avanzan hacia el ISM, van creciendo debido a la condensación de las especies refractarias incrementándose las secciones eficaces de absorción y dispersión. A la vez, el campo de radiación en el que los granos están inmersos y que los acelera, va cambiando. La radiación estelar es atenuada por la absorción y dispersión producidas por el polvo más cercano a la estrella. Además, el propio polvo emite radiación IR como consecuencia del calentamiento sufrido por la interacción con los fotones estelares. En la zona interna de la CSE las temperaturas del polvo también son grandes (500 – 1000 K) estando su máximo de emisión entre 3 y 6 μm . Por lo tanto, una cantidad significativa de la radiación emitida por los granos de polvo es también capaz de acelerar la envoltura.

5. *Al acelerar el gas, el polvo pierde energía que no se invierte en su propia aceleración tendiendo a alcanzar una velocidad aproximadamente constante.* Una vez supuesto que el gas en el que se mueven los granos de polvo se comporta como un fluido viscoso, podemos simular el sistema grano-gas como una esfera moviéndose en su seno. Según Kwok (1975), la fuerza de arrastre (*drift*), F_d , que el fluido ejerce sobre el grano de polvo es:

$$F_d = \alpha \sigma \rho v_d \sqrt{v_d^2 + \frac{27}{16} \frac{k_B T}{\mu m_H}}, \quad (1.1)$$

donde α es una constante referida a la elasticidad de las colisiones entre el grano y las moléculas del gas, μm_{H_2} es la masa media de una molécula genérica del gas, σ es la sección geométrica del un grano esférico genérico, ρ es la densidad másica del gas y $27k_B T/16\mu m_{H_2}$ es aproximadamente igual al cuadrado de la velocidad del sonido del gas, c_s^2 . Además, el grano está sometido a la acción de otras dos fuerzas: la gravitatoria y la procedente de la presión de radiación⁵. Se puede demostrar que, para estrellas evolucionadas, la fuerza de la gravedad es unas 1000 veces menor que la fuerza de radiación y no afecta apenas para granos con radios $\sim 0.1 \mu\text{m}$ (Kwok, 1975).

6. *En su camino hacia el ISM, el gas se expande enfriándose y reduciéndose su densidad.* A partir de un estudio sobre la termodinámica de la expansión en la envoltura de una estrella oxigenada, Goldreich & Scoville (1976) concluyen que el enfriamiento de la CSE se produce por emisión vibracional y rotacional del H_2O cerca de la estrella y por la propia expansión lejos de ella, compitiendo ambos mecanismos en la parte central.

⁵En realidad, en la zona próxima a la estrella también hay que considerar la presión del propio gas pero conforme nos alejamos de la estrella se va haciendo despreciable por la rápida disminución de la densidad y la temperatura

El enfriamiento radiativo tiene su explicación en la pérdida de energía no reabsorbida en forma de radiación procedente de transiciones moleculares, siendo más eficiente en la zona interna por los gradientes de velocidad existentes. El calentamiento parece proceder de absorciones radiativas del H_2O en la zona interna y de las colisiones polvo-gas en el resto de la envoltura (ver Figura 1.5). La actuación simultánea de los

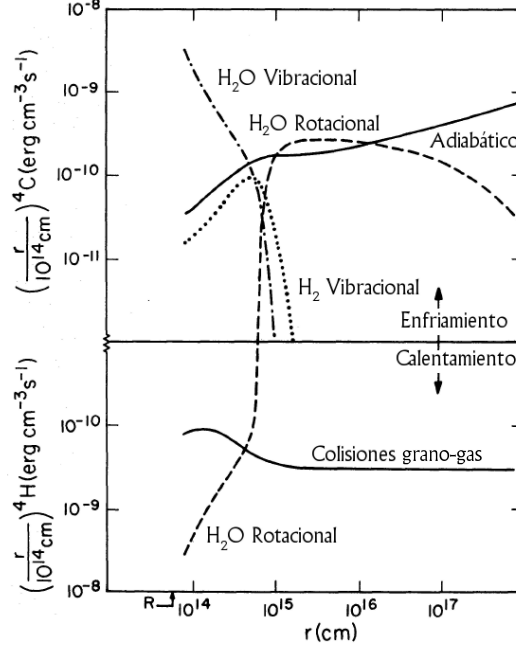


FIGURA 1.5.— Fuentes de calentamiento y enfriamiento en una estrella oxigenada. En la figura superior se muestran las dependencias de los ritmos de enfriamientos, C , en función de la distancia al centro estelar para el caso de una envoltura oxigenada. En la figura inferior se puede ver lo mismo pero relativo a las fuentes de calentamiento, H , en dicha envoltura. Se aprecia claramente cómo en la zona interna de la envoltura tanto el calentamiento como el enfriamiento son consecuencia de procesos moleculares mientras que en las zonas media y externa la propia expansión y el choque entre los granos de polvo y el gas son los mecanismos que más eficazmente influyen en el enfriamiento y calentamiento de la CSE, respectivamente (Figura tomada de [Goldreich & Scoville, 1976](#)).

procesos de calentamiento y enfriamiento trae como consecuencia un decaimiento de la temperatura cinética con el radio más lento que el producida únicamente por la expansión. Considerando que la temperatura cinética decae mediante una ley de potencias con la distancia, el exponente varía entre 0.5 y 1 ([Groenewegen, 1994](#); [Doty & Leung, 1997](#)). Por tanto, los procesos moleculares existentes en la CSE y las especies presentes en la envoltura (química) participan activa y decisivamente en la termodinámica de la envoltura ([Doty & Leung, 1997](#), ver Sección 1.1.4). Por su parte, en estrellas carbonadas los procesos de enfriamiento y calentamiento por acción molecular se deben principalmente a la emisión y absorción radiativa del CO y HCN ([Doty & Leung, 1997](#); [Cernicharo et al., 1996b](#)).

Por otra parte, en cualquier estrella AGB aislada la densidad debe cumplir la condición

$$\dot{M} = \int_{\Sigma} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{s}, \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r})\mathbf{v}(\mathbf{r}), \quad (1.2)$$

donde Σ es una superficie cerrada que contiene a la estrella, \mathbf{j} es la corriente de materia, \mathbf{v} es la velocidad del gas, \dot{M} es el flujo de masa y ρ es la densidad de masa.

Escribiendo ρ en función de las densidades numéricas de todas las especies:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^k \rho_i(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^k m_i n_i(\mathbf{r}) = m_{\text{H}_2} n_{\text{H}_2}(\mathbf{r}) \sum_{i=1}^k \frac{m_i}{m_{\text{H}_2}} x_i(\mathbf{r}), \quad (1.3)$$

donde m_i es la masa molecular y x_i es la abundancia de la especie i con respecto al hidrógeno molecular. Para mostrar claramente de qué depende la densidad supongamos que el gas está formado sólo por una especie molecular con moléculas de masa m y que la CSE presenta simetría esférica. Entonces, tenemos que la densidad de partículas es:

$$n(r) = \frac{\dot{M}(r)/m}{4\pi r^2 v(r)}. \quad (1.4)$$

Es decir, la densidad de partículas depende de:

- a) *La propia expansión.* Dado que la envoltura se expande, existe una dilución en la intensidad de corriente de materia, determinada por el factor r^{-2} geométrico.
- b) *La velocidad de expansión.* Por otra parte, la densidad es inversamente proporcional a la velocidad de expansión. En expansiones isótropas a velocidad constante, la forma funcional que adquiere la densidad depende sólo del factor geométrico r^{-2} . Sin embargo, la existencia de posibles aceleraciones en el proceso de la expansión puede modificar la dependencia radial de la densidad. Este es el caso de las zonas de formación de polvo donde la densidad decae mucho más rápidamente que en el resto de la envoltura⁶. En regiones más externas, el gas es apenas acelerado y la velocidad puede considerarse constante, es decir, $n \propto r^{-2}$.
- c) *El flujo de masa eyectado.* Es bien sabido que la pulsación estelar no es estacionaria en muchos objetos (p.e., [Mauron & Huggins, 2000](#); [Olofsson et al., 2002](#)) pudiendo existir variaciones en la amplitud de las pulsaciones o, quizás, en el modo de oscilación. Este comportamiento irregular produciría una pérdida de masa igualmente irregular. Como la materia eyectada puede tardar más de $\sim 10^3$ años en escapar al ISM desde que es eyectada por la estrella, las variaciones en la eyección de materia a lo largo del tiempo pueden ser observadas como irregularidades de la densidad de polvo en forma de arcos en la CSE (Figura 1.6, [Mauron & Huggins, 1999, 2000](#); [Leão et al., 2006](#)).
- d) *Creación y destrucción de granos de polvo.* El polvo se forma en la envoltura por agregación de ciertas especies refractarias del gas, que sirven de centro de condensación para otras moléculas refractarias. Del mismo modo que hay condensación en los granos de polvo, existe vaporización de la materia que forma los granos ([Watson & Salpeter, 1972](#)). A pesar de que estos procesos de condensación y vaporización puedan modificar significativamente las cantidades en las que se encuentran las especies del gas menos abundantes, el flujo de masa en forma gaseosa apenas varía pues es dos órdenes de magnitud mayor que el flujo de materia en forma de polvo. Observacionalmente, podemos despreciar la contribución del polvo al flujo de masa total eyectado, ya que es bastante menor que el error cometido en la determinación del flujo de materia gaseosa. Es decir, el considerar al flujo de materia gaseosa como constante en toda la envoltura es una buena aproximación.
- e) *La asimetría de la envoltura.* Se observa que este tipo de estrellas no tienen una envoltura perfectamente simétrica encontrándose flujos bipolares en muchas de ellas ([Herpin et al., 2001](#)). Dos los ejemplos más importantes son los casos de

⁶En IRC+10216, a unos $5 R_*$, la velocidad pasa de $\simeq 3 \text{ km s}^{-1}$ a $\simeq 11 \text{ km s}^{-1}$ en sólo $1 R_*$. En esa distancia la densidad se reduce en, aproximadamente, un 75 % sin tener en cuenta el efecto de la propia expansión.

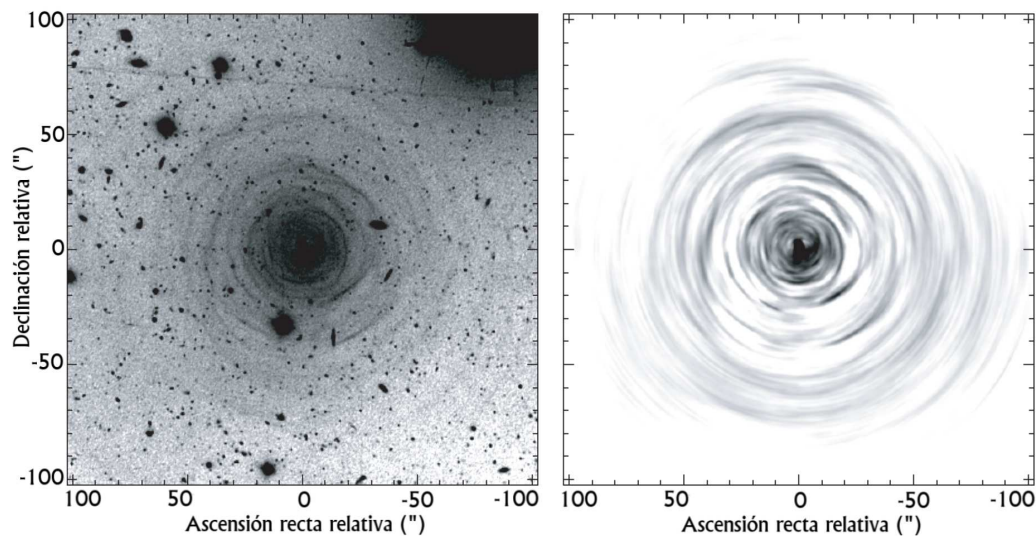


FIGURA 1.6.— Estructura en capas de la envoltura de polvo de IRC+10216. A la izquierda se muestran las observaciones de luz Galáctica reflejada en la envoltura de polvo de IRC+10216 realizadas con el instrumento FORS1/VLT. A la derecha se muestra una visión esquemática de las observaciones. En ambas se ve claramente como la componente de polvo de la CSE está compuesta por arcos (casquetes) delgados y esféricos, aunque no concéntricos, de densidad mayor que sus entornos. Los objetos negros que se ven en la imagen de la izquierda son estrellas que están delante de IRC+10216 (Figura tomada de [Leão et al., 2006](#)).

las PPNe CRL618, que presenta flujos bipolares bien diferenciados, y CRL2688, que está más cerca de su etapa de estrella AGB. Estas asimetrías modifican la función densidad dotándola de una dependencia con los ángulos (θ, ϕ) en coordenadas esféricas que procede principalmente de la asimetría en la velocidad de expansión.

1.1.4. Química circunestelar ([Glassgold, 1996](#))

De las diversas observaciones realizadas sobre estrellas AGB se deduce que existe una gran diversidad de especies moleculares en sus envolturas. Sólo en IRC+10216 se han detectado hasta la fecha más de 50 especies moleculares distintas (sin contar con sus isotopómeros; ver p.e., [Kawaguchi et al., 1995](#); [Cernicharo et al., 2000](#)).

El número de especies y las especies mismas que se lleguen a formar en la CSE depende profundamente de si la estrella es oxigenada o carbonada. Se observan diferencias muy importantes al comparar espectros de estrellas de tipo O y de tipo C (con las de tipo S como mezcla de los dos). Sin embargo, estas diferencias apenas afectan a la evolución estelar. Gracias al trabajo que se ha ido desarrollando durante muchos años, ahora es posible explicar tanto cualitativa como cuantitativamente las abundancias observadas de una cantidad apreciable de especies moleculares. Por desgracia, el actual desconocimiento de muchos parámetros absolutamente necesarios para un estudio preciso de la evolución química de las CSEs, tanto en el campo observacional como en el laboratorio, impide una determinación más precisa de las abundancias de especies detectadas y no detectadas. Además, como la dinámica de la CSE influye considerablemente en las velocidades de las reacciones que se dan en ella, el estudio completo de la evolución química de la envoltura requiere desechar muchas aproximaciones, teóricas y observacionales, necesarias para la evolución de los primeros estadios de las teorías químicas vigentes.

Las cambiantes condiciones físicas a lo largo y ancho de la envoltura suponen que en una misma CSE sea necesario considerar que distintos tipos de reacciones dominan en una u otra región. Por ejemplo, dada la ausencia de iones en las zonas internas de las envolturas, la formación molecular procede de reacciones neutro-neutro, siendo necesario un tercer cuerpo para estabilizar sus productos, y de reacciones endotérmicas, viables cerca de la estrella por la gran temperatura existente (ver Figura 1.7(b)). En las reacciones neutro-neutro,

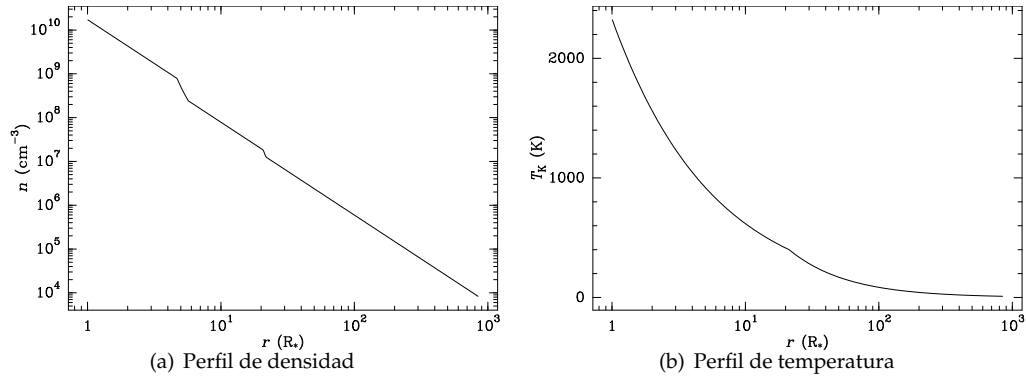


FIGURA 1.7.— Las Figuras (a) y (b) muestran, respectivamente, la densidad y la temperatura de IRC+10216 entre 1 y 80 R_* . Puede verse como en 10 R_* la densidad se reduce en más de 2 órdenes de magnitud y la temperatura pasa de más de 2000 K a 700 K.

para que la acción del tercer cuerpo sea eficiente, la densidad del gas debe ser $\gtrsim 10^{10} \text{ cm}^{-3}$. Es por ello por lo que las reacciones a tres cuerpos no son posibles en regiones lejanas a la estrella, donde las densidades son pequeñas, y dominan la química cuando las densidades igualan y superan ese valor, es decir, cerca de la fotosfera estelar (ver Figura 1.7(a)). La mayoría de los modelos suponen ETL en las zonas internas (entre 5 y 10 R_*) aunque para ello es necesario que el *tiempo de evolución dinámico* de la envoltura sea mayor que el *tiempo químico* de la reacción⁷. La hipótesis de ETL no siempre se puede aplicar con seguridad entre 5 y 10 R_* puesto que las temperaturas son tales que existe condensación en granos de polvo, lo cual puede afectar de manera importante las condiciones en las que se producen las reacciones químicas (Agúndez & Cernicharo, 2006). Por otro lado, a distancias menores de 5 R_* es difícil que se cumpla la condición de ETL pues se espera encontrar choques y, en general, la formación del viento estelar (Cherchneff et al., 1992; Agúndez & Cernicharo, 2006). En puntos relativamente alejados de la estrella las reacciones que dominan son a dos cuerpos, de fotodisociación y asociación radiativa, siendo las únicas reacciones neutro-neutro posibles las que incluyen radicales.

Conforme el radio aumenta, las reacciones endotérmicas y neutro-neutro dejan de ser eficientes y las abundancias de las especies moleculares quedan *congeladas* (McCabe et al., 1979). Debido a la reducción del ritmo de reacción, es posible encontrar especies con abundancias distintas de lo que les correspondería por las condiciones físicas de las zonas en

⁷El tiempo dinámico se puede definir como $\tau_d \sim [(v/n)(dn/dr)]^{-1}$, que es el tiempo que tarda la densidad n de un elemento de volumen de la CSE (que se mueve a una velocidad v) en sufrir una variación relativa de una unidad. Por otro lado, se puede definir el tiempo químico de la reacción $A + B \rightarrow C + D$ que cumple que $dn_C/dt = dn_D/dt = kn_A n_B$ según la expresión $\tau_q \sim (kn_A)^{-1} \sim (kn_B)^{-1}$, que es el tiempo característico que se invierte en hacer reaccionar una sola molécula de tipo B (o A) con otra del tipo A (o B) para dar lugar a dos moléculas de tipo C y D. Ambos tiempos dependen de la posición en la envoltura y, en el caso del tiempo químico, también de la reacción química estudiada. La comparación de los dos tiempos nos dice si en el punto de la envoltura considerado la reacción química alcanza el equilibrio químico rápidamente y se pueden estudiar las abundancias localmente o por el contrario, va a estar afectada por la propia evolución de la CSE y el cálculo de abundancias va a ser un problema no local.

las que están. Los tiempos químicos característicos de las reacciones en las que está involucrada una especie molecular en particular aumentan hasta superar el tiempo dinámico de evolución de la envoltura. En consecuencia, el radio a partir del cual queda *congelada* la abundancia de una especie depende de esa especie.

Con esta química se espera encontrar especies estables con abundancias grandes, como CO, H₂O, C₂H₂, HCN, SiO, SiC, ..., mientras que los radicales son raros (HCO⁺, CH, OH, ...). En las estrellas carbonadas se espera que casi todo el oxígeno pase a formar parte del CO muy cerca de la estrella central, mientras que el carbono restante se reparta entre otras especies. En envolturas oxigenadas ocurre lo contrario siendo raros los compuestos distintos del CO y del CO₂ que contengan carbono.

A distancias de entre 10¹⁶ y 10¹⁷ cm gran parte de las moléculas más fácilmente observables son destruidas por la acción del campo UV interestelar, que es capaz de penetrar hasta la envoltura media. De este modo se crean radicales tan activos como el C₂H y el CN (en estrellas carbonadas, [Huggins & Glassgold, 1982](#)) e iones, que activan la química neutro-neutro e ión-neutro ya en la parte más externa de la CSE y dan lugar a especies complejas como, por ejemplo, {HC_{2n+1}N}_{n=1}⁵, CH₃CN o C₂H₄. A pesar de esto, el CO mantiene prácticamente constante su abundancia debido a su estabilidad y su autoapantallamiento ([Glassgold et al., 1985](#); [Mamon et al., 1988](#)), que le permite no fotodisociarse a pesar del intenso campo UV al que está sometido (ver Figura 1.8). El efecto del autoapantallamiento

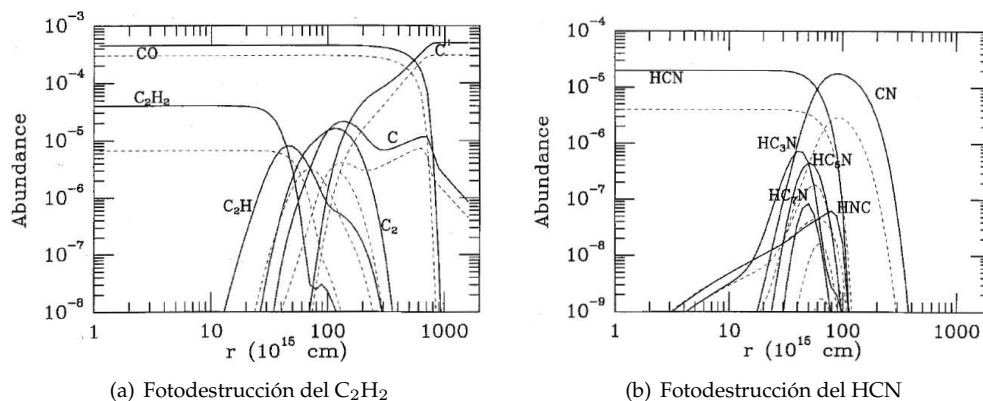


FIGURA 1.8.— Destrucción que sufren las moléculas CO, C₂H₂ y HCN por el efecto de la radiación UV del medio interestelar. Se puede ver cómo las moléculas elegidas son destruidas por la acción de un fotón de alta energía generándose radicales como consecuencia en una capa más o menos delgada. También se aprecia cómo al cabo del tiempo, incluso los radicales son destruidos quedando únicamente átomos neutros e iones (Figura tomada de [Glassgold, 1996](#)).

es tan grande que en IRC+10216 se detecta CO a distancias de 3' – 4', aunque hay que decir que el polvo existente en esas regiones y otras más lejanas también ayuda en la labor de protección del CO. El CO no es la única especie molecular que posee autoapantallamiento aunque sí la que presenta este efecto de manera más intensa. Utilizando la mayor distancia a la que se ha detectado CO se puede estimar un límite inferior para el periodo de tiempo en el que ha existido eyección de materia desde la estrella. Para IRC+10216 los datos indican que la eyección comenzó al menos hace 1.4×10^4 años.

Actualmente, los modelos no son todavía capaces de estimar correctamente las abundancias de todas las especies. Todo esto se debe a que varias magnitudes importantes para los cálculos numéricos son todavía desconocidas, como pueden ser las propiedades del polvo en el UV lejano, las secciones eficaces de fotodisociación (especialmente de los radicales) y la distancia estelar. Un ejemplo importante de fenómeno poco conocido es la generación de especies químicas con distintos grados de complejidad en la superficie de los granos de

polvo (Watson & Salpeter, 1972). De este modo pueden aparecer especies químicas no esperadas o variar su abundancia de manera importante otras que sí son conocidas, pudiendo modificar significativamente las abundancias observadas respecto de las esperadas. Por último, no hay que olvidar las simplificaciones (en ocasiones fuertes) que se han de aplicar a la teoría para poder hacer cálculos abordables numéricamente.

1.1.5. Máseres en estrellas evolucionadas

La emisión intensa de radiación máser a las frecuencias del espectro de rotación pura de algunas moléculas es un fenómeno común en las envolturas circunestelares de las estrellas evolucionadas (Elitzur, 1992; Gray, 1999). Los máseres son generalmente provocados en pequeñas regiones en la CSE y a veces proveen de una información muy valiosa sobre las condiciones físicas de la región emisora.

Debido a la química existente en las estrellas carbonadas u oxigenadas, los máseres son producidos por diferentes especies moleculares y en distintas regiones de la CSE. De hecho, hasta el momento se han encontrado diferentes máseres de OH en la CSE externa de estrellas oxigenadas, mientras que los de H₂O han sido encontrados tanto en las regiones más internas de la envoltura de ciertas estrellas como en las más externas (Humphreys, 2007). Por otro lado, todos los máseres de HCN y de SiO se observan cerca de la estrella central. La situación espacial de las regiones emisoras de radiación máser impone fuertes restricciones sobre las condiciones físicas necesarias para su formación. A continuación hablaremos de los máseres que se forman en las regiones internas de la CSE pues son los que en realidad nos interesan.

En estrellas ricas en oxígeno, se observa intensa radiación máser en varias transiciones rotacionales correspondientes al nivel vibracional $v = 4$ del SiO y $v = 1, 2$ y 3 de sus isotopólogos ^{29}SiO and ^{30}SiO distintos niveles vibracionales del SiO, desde $v = 1$ hasta $v = 4$ (Cernicharo et al., 1991; Cernicharo & Bujarrabal, 1992; Cernicharo et al., 1993; González-Alfonso et al., 1996; González-Alfonso & Cernicharo, 1997; Pardo et al., 1998, 2004a). Se supone que estos máseres son producidos por solapamientos entre líneas rovibracionales del SiO y sus isotopólogos en el infrarrojo cercano y medio ($\Delta v = 1, 2, 3$) y se forman en regiones cercanas a la estrella central.

En estrellas ricas en carbono, aunque el SiO presenta abundancias muy similares a las que tiene en estrellas oxigenadas (Schöier et al., 2006a), no se ha detectado emisión máser procedente de esta especie. Este hecho puede ser explicado considerando que el SiO se forma más lejos de la estrella en CSE carbonadas que en las oxigenadas ($\simeq 3 - 5 R_*$; Agúndez & Cernicharo, 2006). La dilución de la radiación estelar es grande y la densidad y la temperatura menores que en las regiones donde los máseres de SiO se forman en estrellas oxigenadas. En estrellas carbonadas, sólo el HCN emite radiación máser en varias líneas rotacionales puras pertenecientes a los estados vibracionales entre $\nu_2 = 1$ y $\nu_2 = 4$ (Lucas & Cernicharo, 1989; Schilke & Menten, 2003). Estos máseres se deben formar en la parte más interna de la CSE. En el caso del SiS, sólo se ha detectado un máser débil correspondiente a la transición $v = 0$ $J = 1 - 0$ en IRC+10216 (Henkel et al., 1983).

1.1.6. El polvo circunestelar (Andersen, 2007)

La importancia del polvo circunestelar en la evolución de la estrella AGB (y en la evolución del resto de la Galaxia) es evidente. Es por ello, un punto importante a tratar en esta Tesis y en cualquier investigación que pretenda obtener resultados ajustados a la realidad.

Experimentalmente, sólo es posible la obtención de granos de polvo reales a partir de muestras del propio Sistema Solar. Estos granos de polvo contienen granos presolares procedentes de otras partes de nuestra Galaxia, siendo posible aislar estas porciones de polvo y estudiar los sistemas en los que fueron creados. De estos estudios se desprende que los granos de polvo presolares están formados principalmente en estrellas AGB (Glassgold, 1996) siendo la contribución del polvo formado en supernovas una pequeña fracción del

total. Igualmente, se encuentra que el SiC presenta distribuciones de tamaño que se pueden relacionar tanto con estrellas carbonadas como oxigenadas o de tipo S. Esto supone un mecanismo de formación común a los distintos tipos de fuentes.

Gracias a muchos experimentos de laboratorio se han llegado a estudiar granos de polvo similares a los encontrados en las estrellas AGB mediante dos métodos distintos, cada uno con sus pros y sus contras:

1. Se crea en laboratorio el material que se quiere estudiar en forma de láminas (o equivalentes) y se derivan experimentalmente la opacidad del material a partir de la medición de la absorción o emisión de la muestra. La obtención de las propiedades ópticas del material supone conocer el camino óptico de la luz incidente dentro de la muestra, suponiéndola homogénea. Además, es necesario el suponer una distribución de tamaños de granos de polvo con las incertidumbres que ello plantea.
2. Se crea en laboratorio una población de granos de polvo que se aíslan unos de otros mediante su fijación en una matriz transparente a la radiación aplicada. Sin embargo, a pesar de que este experimento parece libre de incertidumbres, los granos de polvo tienden a agruparse en conjuntos de granos lo que puede dar resultados muy distintos de los que daría la población de granos aislada.

En general, los granos de polvo presentan una serie de características que conviene comentar. La absorción de radiación se produce en dos bandas distintas: en el IR y en el UV. Existe una resonancia en el IR causada por los acoplamientos entre la radiación incidente y las frecuencias de oscilación de la red molecular. La otra banda supone la existencia de transiciones electrónicas entre estados ligados. La absorción de energía por el polvo en las zonas internas de las estrellas AGB se produce por resonancias entre la zona del UV de la radiación estelar, que es bastante más intensa que la IR, y la banda de absorción UV del espectro del polvo. La mayor parte de esta energía UV pasa a formar parte de la red cristalina y es emitida en el IR. Por ello, cuanto más rápido caiga la absorción del polvo con la longitud de onda, más caliente estará el grano: éste absorbe mucha más radiación UV de la que puede emitir en el IR y parte de la energía absorbida se queda en forma de fonones en la red cristalina. Según esto, una temperatura de grano muy grande impide un crecimiento eficiente de granos de polvo en la atmósfera estelar. Esta es la razón por la que la mayor parte de los granos se forman a temperaturas menores, aunque observacionalmente, los granos parecen necesitar una densidad mayor para su formación que la considerada en los modelos actuales. Este incremento en la densidad necesaria puede aparecer debido al proceso de levitación generado por la pulsación estelar: los granos de polvo pueden permanecer durante un tiempo relativamente largo en zonas que benefician su crecimiento llegando incluso a generarse granos mayores que la media.

El carbono amorfo es el principal constituyente del polvo en estrellas AGB carbonadas. Este compuesto es en realidad una mezcla amorfa de compuestos carbonados con todas las hibridaciones posibles. Dependiendo del tipo de las micropropiedades del carbono amorfo utilizado, la absorción puede variar en un orden de magnitud. Este hecho apenas cambia el comportamiento hidrodinámico de la envoltura pero sí el continuo emitido por la estrella.

El carburo de silicio (SiC) es el otro componente más abundante en el polvo de las estrellas carbonadas aunque también se genera en las oxigenadas en menor proporción por la menor cantidad disponible de carbono. Es el causante de la banda que aparece entre 11 y 11.5 μm . Se sabe que cuanto menor sea la ordenación de la red cristalina, más ancha será la banda de absorción. A partir de comparaciones realizadas entre las observaciones y los experimentos de laboratorio con SiC, se concluye que el SiC que se encuentra en los granos de las CSE es cristalino principalmente. Otros experimentos indican que la morfología de los granos de SiC es más importante que la estructura cristalina de los mismos. El Si atómico desaparece por debajo de ≈ 1550 K. Mediante cálculos en ETL se estima que sólo la mitad va a parar al SiC sólido. La otra mitad se mantiene en estado gaseoso formando parte del SiS (Glassgold, 1996).

En las estrellas oxigenadas el Si se encuentra en una gran proporción en silicatos de magnesio y hierro debido a la riqueza en oxígeno de la envoltura. Al igual que se encuentra SiC en estrellas oxigenadas, también es posible encontrar silicatos en carbonadas. Los silicatos son las especies moleculares más estables que se pueden formar en presencia de O, Si, Fe y Mg. Se estima que sólo un 10 % de los silicatos encontrados en estrellas AGB está en forma cristalina. Igualmente, se estima que a 1000 K sólo un $\simeq 25\%$ del Mg va a parar al MgS. Las propiedades ópticas de estos materiales tienen resonancias entre 10 y 20 μm por el movimiento de tensión del enlace Si-O y el de flexión del conjunto O-Si-O.

Dependiendo de la razón entre la abundancia de carbono y oxígeno (estrellas carbonadas u oxigenadas), el polvo que se forme en las envolturas estará formada principalmente por granos carbonáceos ($\text{C/O} > 1$) o por silicatos ($\text{C/O} < 1$).

1.1.7. Nebulosas protoplanetarias

Como vimos al final de la Sección 1.1.1, la fase PN sigue a la fase AGB siendo la fase PPN el transitorio entre las dos anteriores (Iben & Renzini, 1983). Esta fase (o interfase) se considera muy rápida en la evolución estelar (de unos 1000 años según Bujarrabal et al., 1988) pues apenas hay estrellas observadas que pertenezcan a este tipo de objetos. Se han detectado unos cientos de ellas (Kwok, 1993) pero sólo han sido confirmadas unas decenas (Bujarrabal et al., 2001). En realidad, casi todo lo que se sabe acerca de las PPNs ha sido aprendido mediante el estudio de las fuentes carbonadas CRL618, CRL2688 y la estrella oxigenada OH231.8+4.2 (Woods et al., 2005).

La eyección por parte de las estrellas AGB de la mitad de su masa en los últimos momentos de esa fase, produce severos cambios en la CSE generada por la estrella progenitora y determinan la morfología, la cinética y la química de la futura PN. Aún no se sabe a ciencia cierta qué mecanismo físico produce la eyección de tal cantidad de materia, habiendo varias teorías que se barajan como plausibles (ver Sección 1.1.1 y, por ejemplo, Nordhaus et al., 2007).

Sea como fuere, la eyección de parte de la atmósfera se produce a velocidades mayores a las de la antigua CSE ($v_{\text{atm}} - v_{\text{CSE}} \simeq 10 \text{ km s}^{-1}$), produciéndose una colisión entre ambas. La consecuencia de este choque es la formación de una capa de alta densidad, midiéndose temperaturas de excitación grandes ($\simeq 2000 \text{ K}$ para el caso de CRL618), en la zona de contacto que alcanza una velocidad constante debido al freno a su avance que suponen los restos de la CSE generada en la fase AGB (Kwok et al., 1978; Thronson, 1981). Por otro lado, la radiación en el UV lejano generada por la nueva estrella central (lo que era el núcleo de la estrella AGB progenitora) es capaz de fotodisociar e ionizar el gas de las regiones próximas a ella, dando lugar a una región HII con una cantidad apreciable de polvo y rodeada por una PDR (Hollenbach & Natta, 1995; Justtanont et al., 2000) situada a radios $\sim 10^{15} \text{ cm}$ y con densidades $\sim 10^7 \text{ cm}^{-3}$ (Woods et al., 2005). Además, durante todo este proceso se observa la acción de un superviento que puede llegar a alcanzar los 200 km s^{-1} (Cernicharo et al., 1989; Neri et al., 1992) dando lugar a flujos bipolares de diferentes formas (Balick & Frank, 2002; Dwarkadas et al., 1996; Soker & Livio, 1989) que atraviesan la nueva región de la CSE compuesta por la materia de la atmósfera eyectada. Como ejemplo, podemos hablar de CRL618 que presenta flujos bipolares dispuestos *a grosso modo* en una sola dirección (p.e., Sánchez-Contreras et al., 2002) o de CRL2688, que está compuesto por dos flujos bipolares que se expanden en direcciones más o menos ortogonales (Cox et al., 2000). Las diferentes formas que toman las PNe parecen estar relacionadas con diferencias de densidad en las CSE a lo largo de distintas direcciones. Ignace et al. (1996) demuestran que basta un incremento de un factor 2 en la densidad entre los polos y el ecuador de la CSE de la estrella AGB para romper la simetría esférica y que aparezcan flujos bipolares. Debido a la confinación que sufren estos flujos bipolares es difícil que el resto de la envoltura cercana a la estrella central se vea afectada (Bachiller et al., 1997).

Así pues, estos cambios tan extraordinarios en las condiciones físicas de la envoltura interna y la riqueza en especies moleculares alcanzada en los últimos estadios de la fase

AGB parecen ser la causa de la aparición de una fotoquímica muy rica cerca de los restos de la estrella progenitora, como veremos en la siguiente Sección.

1.1.8. Química en nebulosas protoplanetarias

Aproximadamente unos 500 años después del cese de la eyección de materia, los fotones UV procedentes de la nueva estrella central comienzan a fotodisociar el material molecular existente en la zona próxima a la fotosfera. El ritmo de ionización es grande y las moléculas son destruidas rápidamente. En el caso del CO, el autoapantallamiento podría resistir la acción del campo de radiación UV hasta 12000 años. Ese periodo de tiempo permite a la región HII expulsar parte del polvo que contiene y a la envoltura evolucionar, expandiéndose. La consecuencia es la reducción de la atenuación que sufre la radiación UV al penetrar en la envoltura. Cuando esa atenuación es menor que 10 mag o una densidad de columna $\simeq 1.6 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$, la radiación UV comienza a disociar las moléculas rápidamente. Considerando una envoltura próxima a la estrella de forma toroidal, las moléculas padres son fotodisociadas en unos 100 años. El ritmo de fotodisociación no es demasiado rápido permitiendo la producción de una gran cantidad de reacciones químicas y dando lugar a un gran número de especies químicas, algunas de gran complejidad. Sin embargo, suponiendo que la envoltura sigue expandiéndose a una velocidad de 15 km s^{-1} , estas nuevas moléculas son fotodisociadas en apenas 200 años (Woods et al., 2003, 2005). En el caso de la PPN NGC 7027, con una estrella central muy caliente, se observa que a pesar de la intensidad del campo de radiación, el número de especies moleculares observadas es muy alto. Howe et al. (1992) han propuesto la existencia de un apantallamiento adicional que podría proceder de grumos de gas neutro.

Hasta ahora hemos visto que la evolución de las estrellas AGB inmediatamente después de la eyección masiva de la atmósfera estelar genera una serie de cambios muy importantes en la zona más interna de la envoltura circunestelar, cerca de la nueva estrella central (CSE-PPN). Sin embargo, no podemos olvidar que la fase PPN es la siguiente a la AGB, por lo que la parte externa de la CSE son los restos de la envoltura de la estrella AGB (CSE-AGB). Es por ello que la química en la CSE-PPN debe ser similar a la de la zona externa de la CSE-AGB (Woods et al., 2003) y está generada a partir de ésta última, pudiéndose encontrar prácticamente las mismas especies moleculares en ambas partes de la envoltura (Pardo & Cernicharo, 2007). No obstante, al producirse los procesos químicos en una zona mucho más densa que la zona externa de la CSE-AGB y ser el campo de radiación UV mucho más intenso, las escalas de tiempo involucradas en las reacciones químicas en la CSE-PPN deben ser ostensiblemente más cortas que en el caso de la CSE-AGB (Cernicharo et al., 2001b).

Al igual que en el caso de las estrellas AGB, se observa que las PPNe carbonadas presentan una química más rica que las oxigenadas. La emisión molecular en PPNe con menos de 300 años es mucho más intensa y variada que para el resto. Es el caso de, por ejemplo, CRL2688 y CRL618 frente al Rectángulo Rojo o NGC 2346, en cuyos espectros las líneas moleculares son menos numerosas (Remijan et al., 2005). En el caso de las PPNe carbonadas, la química que prevalece está basada en la fotodisociación del C_2H_2 , del HCN, del CO y del H_2 , muy abundantes en la CSE-PPN. La acción de la radiación UV sobre las dos primeras especies da lugar a los radicales C_2H y CN, que son muy reactivos, además de producir carbono, oxígeno e hidrógeno atómicos. Gracias a la eficiencia de las reacciones ión-neutro, la gran densidad prevaleciente en la CSE-PPN y las temperaturas de entre 100 y 1000 K, aparecen largas cadenas carbonadas como los poliínos (C_nH_2 , n par), metilpoliínos ($\text{CH}_3\text{C}_n\text{H}$, n par), cianopoliínos (HC_nN , n impar), metilcianopoliínos ($\text{CH}_3\text{C}_n\text{N}$, n impar), alquenos como C_2H_4 e incluso benceno (C_6H_6 ; Bujarrabal et al., 1988; Cernicharo et al., 2001a,b; Pardo et al., 2004b; Cernicharo, 2004a). La acción del carbono atómico sobre los radicales anteriores podría crear los cumulenos (C_n , todavía no observados en este tipo de objetos), mientras que la existencia de oxígeno e hidrógeno afectarían a la química para generar moléculas como H_2O , CO_2 , H_2CO , SiO , OH y HCO^+ (Cernicharo, 2004a; Cernicharo et al., 1989; Herpin & Cernicharo, 2000; Bujarrabal et al., 1988; Waters et al., 1998; Bachiller

et al., 1997). También se ha propuesto la posibilidad de que el agua proceda de choques o evaporación en CSEs carbonadas (Woods et al., 2003). La procedencia del oxígeno necesario para la creación de las moléculas oxigenadas anteriores no está nada clara actualmente, pudiendo proceder de la fotodisociación del CO en la PDR (Cernicharo, 2004a), aunque también puede ser la consecuencia de un cambio en la razón C/O por la propia evolución de la estrella (ver Sección 1.1.1).

1.2. El caso de la estrella AGB IRC+10216

IRC+10216 (CWLeo) es la estrella AGB carbonada más cercana a La Tierra y el mayor emisor IR que se encuentra en el cielo. Por ello se ha convertido en el paradigma de las estrellas AGB, siendo un objeto muy útil para el estudio de las últimas etapas de la evolución estelar y el contraste de los modelos desarrollados. Las observaciones indican que la estrella central no puede ser observada directamente debido a la gran profundidad óptica de la CSE y que ésta última es muy rica en fenómenos físicos y químicos. Sin embargo, aunque esta fuente ha sido extensamente estudiada desde su descubrimiento por Neugebauer & Leighton (1969), la mayor parte de estos procesos físicos y químicos siguen siendo poco entendidos (ver, por ejemplo, Agúndez & Cernicharo, 2006).

1.2.1. Algunos datos globales

IRC+10216 eyecta materia (en forma de gas y polvo) a un ritmo de $1-2 \times 10^{-5} M_{\odot} \text{ año}^{-1}$ (Keady et al., 1988; Cernicharo et al., 1996b, 1999). La eyección de polvo que se deriva de diferentes observaciones es de $\simeq 2-4 \times 10^{-7} M_{\odot} \text{ año}^{-1}$ (Ridgway & Keady, 1988; Men'shchikov et al., 2001), aunque este valor es poco preciso. La estrella pulsa con un periodo de 636 ± 3 días (Ridgway & Keady, 1988; Dyck et al., 1991; Jones et al., 1989). La temperatura efectiva de la estrella, T_{eff} , que se puede encontrar en la literatura varía de un autor a otro: 2330 ± 350 K (Ridgway & Keady, 1988), 2200 ± 150 K (Ivezić & Elitzur, 1996), 1915 K cuando la estrella está en fase 0.16 y 2105 K en fase 0.27 (Bergeat et al., 2001) y 2800 y 2500 K para el máximo y mínimo brillo, respectivamente (Men'shchikov et al., 2001).

La distancia a IRC+10216 no está bien determinada variando entre 120 y 300 pc (Doty & Leung, 1997; Keady et al., 1988; Weigelt et al., 2002; Bergeat et al., 2001; Loup et al., 1993; Cernicharo et al., 2000; Herbig & Zappala, 1970). A partir de observaciones interferométricas y datos obtenidos por el método de ocultación lunar, Ridgway & Keady (1988) proponen un radio angular de $0''.019 \pm 0''.003$, el valor obtenido por Monnier et al. (2000a) es $0''.022$, y Men'shchikov et al. (2001) sugieren un radio angular estelar que varía entre $0''.014$ y $0''.018$ sobre un periodo completo de pulsación, mientras que Keady et al. (1988) asumen $0''.023$. Estos valores angulares se corresponden con $\simeq 815 R_{\odot}$ para una distancia de 200 pc, habiendo sido obtenidos a partir de observaciones a 1.65 , 2.2 , 3.15 , and $4.95 \mu\text{m}$; $\simeq 635 R_{\odot}$ para una distancia de 135 pc a partir de observaciones en el rango $8-12 \mu\text{m}$; y un radio que varía entre 390 y $500 R_{\odot}$ con una distancia asumida de 130 pc a partir de observaciones entre $0.6 \mu\text{m}$ y 6 mm , y $\simeq 970 R_{\odot}$ con una distancia de 200 pc, respectivamente.

1.2.2. El gas en IRC+10216

Las condiciones físicas en la zona más interna de la CSE propician el equilibrio termodinámico. Sin embargo, el gas podría estar fuera del equilibrio debido a la acción de ondas de choque periódicas generadas por la pulsación estelar (Cherchneff et al., 1992; Agúndez & Cernicharo, 2006). Para las temperaturas existentes en esas regiones, la mayor parte de los átomos forman parte de moléculas, principalmente H_2 . La química es tan rica que más del 50% de las especies conocidas en el espacio han sido detectadas por primera vez en esta fuente (ver, por ejemplo, Morris et al., 1975; Betz, 1981; Cernicharo et al., 2000, 2004b, y referencias). Algunas de las moléculas, como SiO (Schöier et al., 2006a), SiS, CS

(Lucas et al., 1995) y especies con metales (Cernicharo & Guélin, 1987; Cernicharo et al., 2000), son refractarias y se forman en la envoltura interna. Otras especies, principalmente radicales, emiten desde la parte externa de la CSE (por ejemplo, Dayal & Bieging, 1993, 1995; Lucas et al., 1995; Cernicharo & Guélin, 1996a; Lindqvist et al., 2000), donde el campo de radiación UV Galáctico fotodisocia las moléculas estables formadas en la zona interna de la CSE, y reacciones neutro-radical producen largas cadenas carbonadas (Cernicharo & Guélin, 1996a; Guélin & Cernicharo, 1997; McCarthy et al., 2006), y la química gaseosa del oxígeno (Agúndez & Cernicharo, 2006, y Sección 1.1.4).

El campo de velocidades que se ha considerado necesario hasta el momento para ajustar correctamente las líneas moleculares formadas desde de la fotosfera, requiere que el gas pase por dos regímenes de aceleración principales antes de alcanzar la velocidad terminal de expansión (Keady et al., 1988). La posición de las zonas de aceleración podría estar relacionada con la temperatura de condensación de diferentes especies moleculares refractarias. Según lo anterior, se cree que el gas es acelerado a $\simeq 2 \text{ km s}^{-1}$ cerca de la fotosfera estelar a causa de fenómenos relacionados con la pulsación de la estrella (ver Sección 1.1.3.1), para ser de nuevo acelerado en una región muy estrecha ($\simeq 1 R_*$) debido a la condensación de algunos materiales carbonados, hasta alcanzar una velocidad más o menos constante de $\simeq 11 \text{ km s}^{-1}$. La posición de esta zona de aceleración interna es de $\simeq 5 R_*$ (Ridgway & Keady, 1988) mientras que a $\simeq 15 R_*$, parece que otras especies refractarias compuestas por Mg y/o S condensan y el gas alcanza su velocidad terminal de $\simeq 14 \text{ km s}^{-1}$ (p.e., Huggins & Healy, 1986; Cernicharo et al., 2000). En realidad, Keady et al. (1988) detectan un leve incremento de la velocidad de expansión desde de la segunda zona de aceleración, necesario para un ajuste preciso de las líneas rovibracionales del CO, llegando a $\simeq 16 \text{ km s}^{-1}$ a $5000 R_*$ (ver Figura 1.9).

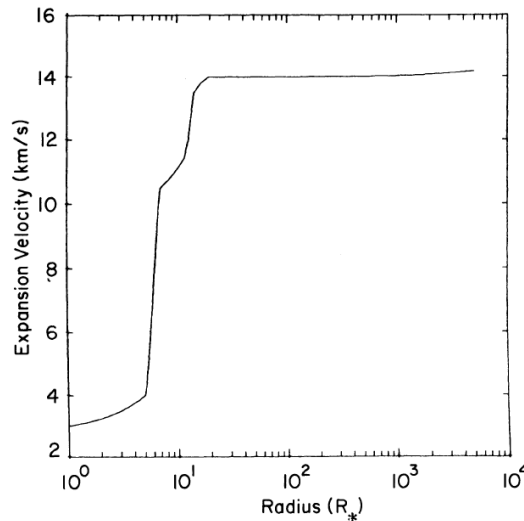


FIGURA 1.9.— Perfil de velocidades del gas en IRC+10216. El perfil está compuesto por tres regiones con velocidad aproximadamente constante y dos zonas de aceleración situadas a distancias bien definidas (Figura tomada de Keady & Ridgway, 1993).

La velocidad de turbulencia propuesta por Keady et al. (1988) es de $\simeq 5 \text{ km s}^{-1}$ en la zona interna de la CSE y de $\simeq 1 \text{ km s}^{-1}$ hacia el final de la envoltura. Sin embargo, en un trabajo posterior donde Keady & Ridgway (1993) estiman las abundancias del NH_3 , llegan a la conclusión de que a distancias mayores de $450 R_*$ la velocidad de turbulencia es $\simeq 0.8 \text{ km s}^{-1}$. Además, es posible encontrar en la literatura velocidades de turbulencia similares o incluso menores, como por ejemplo, 0.92 km s^{-1} (Huggins & Healy, 1986) ó 0.65 km s^{-1} (Skinner et al., 1999).

La temperatura cinética decae desde 2300 a 1200 K en los primeros $3 R_*$ (Keady et al., 1988), para volver a caer hasta los $\simeq 200$ K a $100 R_*$ (Keady & Ridgway, 1993), siguiendo una dependencia con la distancia del tipo $r^{-\alpha}$. El valor del exponente α que se puede encontrar en la literatura depende del autor y de la región de la CSE estudiada, siendo $\alpha \simeq 0.6 - 0.7$ a distancias menores a $17 R_*$ y $\alpha = 1.3$ si $r > 17 R_*$ (Keady et al., 1988, mediante ajustes de líneas en el infrarrojo), $\alpha = 0.525$ si $r < 400 R_*$ (Keady & Ridgway, 1993, también mediante ajuste de líneas en el infrarrojo), y $\alpha = 1.0$ para Doty & Leung (1997), a partir de ajustes de líneas en radio y justificándolo mediante un modelo sencillo teórico basado en el enfriamiento de la CSE por emisión de radiación a través de líneas de CO.

El perfil de densidad que se utiliza en general es del tipo $n \propto r^{-2} v_{\text{exp}}^{-1}$ que procede de la ecuación de continuidad (ver Sección 1.1.2). Sin embargo, a pesar de que ésta ecuación debe cumplirse (considerando también la materia que pasa a formar parte del polvo), no es imprescindible que la envoltura interna tenga simetría esférica. De hecho, como veremos en la Sección 1.2.3 que está dedicada al polvo circunestelar, la estructura interna de la componente del polvo de la CSE se aleja mucho de la simetría esférica por lo que también podría ocurrir que la componente gaseosa se desviara significativamente. Desafortunadamente, no es posible deducir esta información observacionalmente a día de hoy. Las observaciones interferométricas moleculares con mayor resolución espacial existentes hasta el momento de la zona interna de IRC+10216 han sido realizadas con un haz de tamaño $2''.3 \times 1''.5$ utilizando el SMA (Young et al., 2004). Las isofotas de la línea $J = 14 - 13$ del CS son muy elípticas en la CSE interna no observándose ninguna irregularidad (Figura 1.10), aunque es posible la existencia de irregularidades a escalas menores. Otras moléculas han

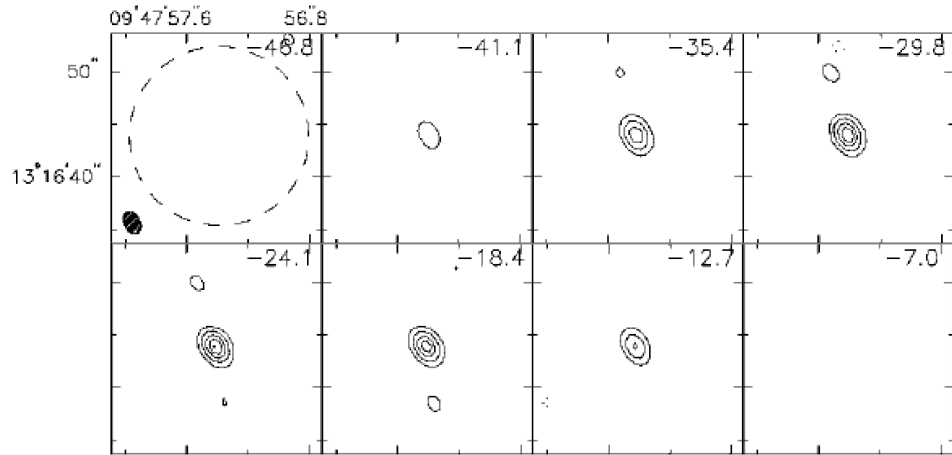


FIGURA 1.10.— Observaciones interferométricas de IRC+10216 utilizando la línea $J = 14 - 13$ del CS a 685.436 GHz. La anchura del haz sintético es de $2''.3 \times 1''.5$. La circunferencia discontinua del recuadro superior izquierdo es el FWHM del haz primario ($17''$). El haz sintético se puede ver en negro en la parte inferior de ese mismo cuadro. Se aprecia claramente la forma elipsoidal de la fuente en el resto de los recuadros (Figura tomada de Young et al., 2004).

sido utilizadas para realizar observaciones interferométricas de IRC+10216 con resoluciones espaciales mayores, como es el caso de las observaciones realizadas con el SMA de la línea $J = 5 - 4$ del SiO realizadas por Schöier et al. (2006b, Figura 1.11) o las obtenidas por Lucas et al. (1995) con el interferómetro de Plateau de Bure de diferentes líneas de SiS, SiC₂, CS y CN con resoluciones angulares de $3'' - 4''$. Ambas observaciones indican igualmente una simetría más o menos esférica a gran escala con ciertas irregularidades y un poco más elíptica en las regiones más internas de la envoltura.

En cuanto a las especies moleculares observadas en esta estrella, el número es muy gran-

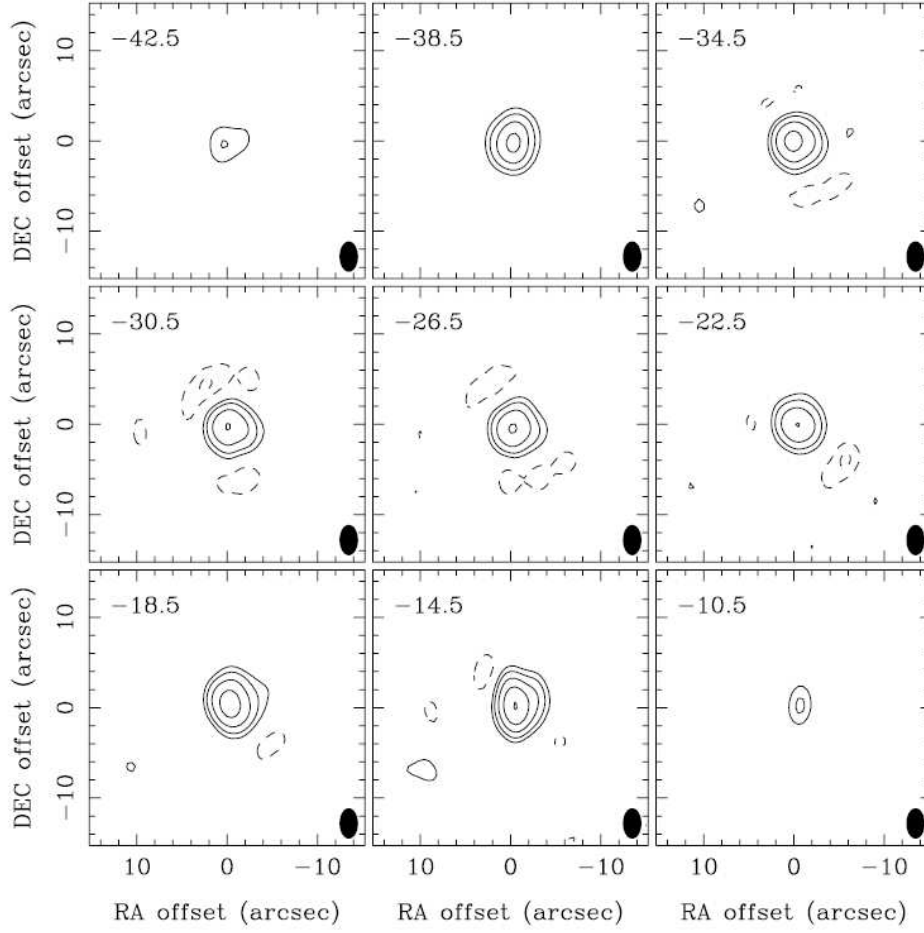


FIGURA 1.11.— Observaciones interferométricas de IRC+10216 realizadas con el SMA utilizando la línea $J = 5 - 4$ del SiO. El tamaño del beam es de $3''.3 \times 2''.0$. La región de la CSE muestreada parece tener una simetría más o menos esférica (Figura tomada de [Schöier et al., 2006b](#)).

de pero en realidad sólo nos interesan las que se dan en la envoltura interna de IRC+10216. De todas las especies moleculares detectadas en IRC+10216 muy pocas son las que se forman cerca de la fotosfera con abundancias relativamente grandes (ver Figura 1.12). Las especies moleculares más abundantes, después del H_2 , son CO, C_2H_2 , HCN y SiS. CO tiene una abundancia de $\simeq 8 \times 10^{-4}$ y se extiende desde la fotosfera estelar hasta más allá de $1000 R_*$ ([Lafont et al., 1982](#); [Knapp & Morris, 1985](#); [Agúndez & Cernicharo, 2006](#)). Diferentes observaciones infrarrojas indican que la abundancia de C_2H_2 es de $\simeq 8 \times 10^{-5}$, siendo posible encontrar esta especie molecular por lo menos entre 1 y $40 R_*$ ([Keady & Ridgway, 1993](#); [Cernicharo et al., 1999](#)), aunque los modelos químicos indican que se extiende hasta distancias de varios cientos de radios estelares (Figura 1.8). La abundancia de HCN, $\simeq 3 - 4 \times 10^{-5}$, se obtiene de observaciones en radio, infrarrojo lejano e infrarrojo medio ([Keady & Ridgway, 1993](#); [Cernicharo et al., 1996b, 1999](#)) extendiéndose en la envoltura hasta distancias similares a las del C_2H_2 . El SiS por su parte tiene una abundancia de $\simeq 4 \times 10^{-5}$ cerca de la fotosfera pero a $\simeq 12 R_*$ decae y pasa a valer $\simeq 4 \times 10^{-6}$, extendiéndose después hasta más de $500 R_*$ ([Boyle et al., 1994](#); [Lucas et al., 1995](#)).

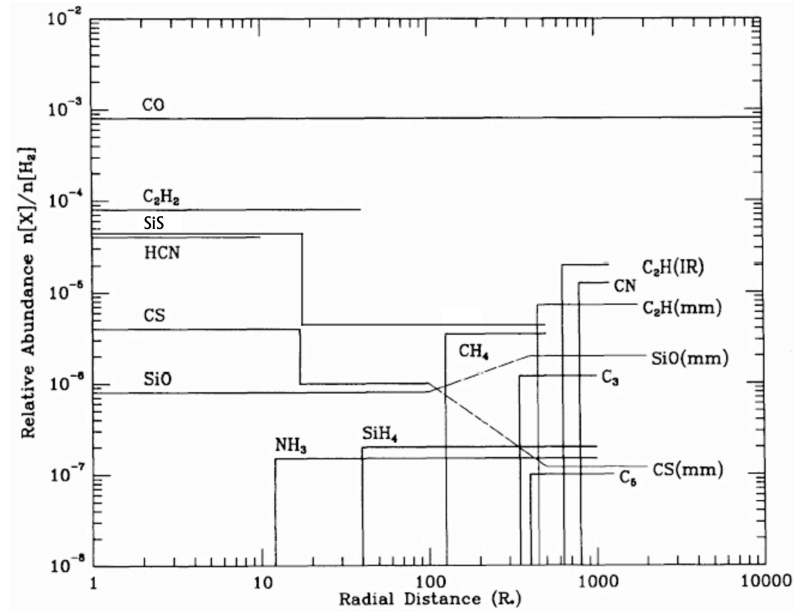


FIGURA 1.12.— Abundancias moleculares en la región interna de la CSE de IRC+10216. La estabilidad molecular del CO hace que sea la especie más abundante por detrás del H_2 , seguido por el C_2H_2 y el HCN y el SiS con abundancias similares. Estas cinco especies moleculares se forman muy cerca de la fotosfera estelar y se extienden hasta distancias muy grandes ($r \sim 10^{18}$ cm para el CO y $r \sim 10^{17}$ cm para el C_2H_2 y el HCN). El caso del SiS es especial con respecto a las otras moléculas porque parece que existe una depleción a $\simeq 12 R_*$. Algunas moléculas como el NH_3 no se forman en la fotosfera pero sí en capas relativamente cercanas a ella. La mayor parte del resto de las especies moleculares aparece en la zona externa de la CSE debido a la acción de la radiación UV Galáctica, que fotodisocia las moléculas neutras procedentes del interior de la CSE y activa una química muy rica (ver Sección 1.1.4, Figura tomada de Keady & Ridgway, 1993, y completada con datos de Boyle et al. 1994).

1.2.3. El polvo en IRC+10216

Los resultados de los estudios realizados hasta el momento sobre el polvo en IRC+10216 (ver, por ejemplo, Keady et al., 1988; Ivezić & Elitzur, 1996) indican que la mayor parte de materia que forma los granos es carbono amorfo. Todavía no se sabe a ciencia cierta qué especie molecular condensa en la CSE interna para dar lugar a esta composición, aunque se sospecha que debe estar relacionada con el C_2H_2 (Frenklach & Feigelson, 1997). El carbono amorfo produce el grueso del continuo no habiendo ninguna banda de estado sólido que dé información sobre este material (Figura 1.13). El segundo componente en importancia es el SiC. Es una especie muy refractaria y tiene temperaturas de condensación de unos 2000 K (Men'shchikov et al., 2001), por lo que podría condensar incluso muy cerca de la atmósfera estelar y dar lugar a los centros de condensación del resto de las especies moleculares refractarias, incluida aquella o aquellas que dan lugar al carbono amorfo. En el espectro del continuo se observa claramente una banda a $\simeq 11.3 \mu m$, que se suele asociar al SiC. Aún no se puede decir con precisión si está en estado amorfo o cristalino, aunque a partir de diferentes estudios la mayor parte de los investigadores se decantan por la estructura cristalina (Mutschke et al., 1999). Por último, el tercer componente más abundante se cree que da lugar a la banda observada a $\simeq 27 - 30 \mu m$. Se han propuesto varios candidatos para su generación como son el MgS (Nuth et al., 1985) o conglomerados de sulfuros de Fe y/o Mg (por ejemplo, Begemann et al., 1994; Men'shchikov et al., 2001). Cálculos realizados por Ivezić & Elitzur (1996) indican que las cantidades relativas de estos tres componentes son

$\simeq 95\%$ de carbono amorfo, $3 - 8\%$ de SiC, y menos del 10% de MgS.

El polvo es extremadamente importante en la CSE de IRC+10216. Su emisión es tal que el continuo está completamente dominado por él, no pudiéndose ver la estrella central mediante ninguna técnica observacional. [Ridgway & Keady \(1988\)](#) estiman que la extinción debida al polvo es $A(\lambda) = 11.8\lambda^{-1}$ y el flujo bolométrico de $(1.41 \pm 0.14) \times 10^{-12} \text{ W cm}^{-2}$. La temperatura del polvo en la frontera interior de esta componente de la CSE no está bien determinada a partir de las observaciones, variando entre $750 \pm 50 \text{ K}$ ([Ivezić & Elitzur, 1996](#)) y $1100 \pm 100 \text{ K}$ ([Ridgway & Keady, 1988](#); [Groenewegen, 1997](#)). En general se suele considerar un decaimiento con la distancia que sigue la ley $r^{-2/(4+p)}$ (ver Apéndice A.6), habiendo sido estimada mediante la condición de equilibrio térmico del polvo para una envoltura ópticamente transparente y donde p es el exponente de la ley de absorción del polvo a grandes rasgos, $a_\nu \propto \nu^p \propto \lambda^{-p}$. En general, $p \simeq 1$ siendo, por ejemplo, la ley de temperaturas del polvo $r^{-0.39}$ para [Ridgway & Keady \(1988\)](#). Si bien esta componente de la envoltura está bastante fría y diluida en las regiones exteriores, en la zona interna es bastante densa y caliente pudiendo haber desviaciones de la ley de temperaturas propuesta. Es por ello que es esperable una emisión importante en el rango infrarrojo (ver Figura 1.13).

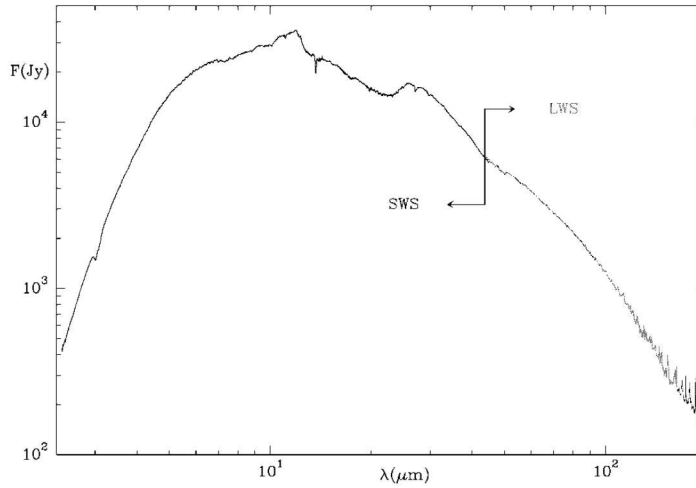


FIGURA 1.13.— Continuo de IRC+10216 tomado con ISO. El espectro fue tomado con los instrumentos SWS (*Short Wavelength Spectrometer*) y el LWS (*Long Wavelength Spectrometer*) y con una resolución espectral de $\simeq 2000$, siendo la anchura del haz del telescopio de $\simeq 20''$. La emisión térmica producida por las temperaturas a las que están los granos de polvo, la mayor parte de la emisión del continuo se produce en el infrarrojo medio. Como hemos visto anteriormente, las bandas que se pueden observar (a $11.3 \mu\text{m}$ y $\simeq 27 - 30 \mu\text{m}$) corresponden al SiC y al MgS o compuestos similares. En el espectro también se pueden observar diferentes bandas moleculares no resueltas producidas por CO, C_2H_2 , HCN y otros compuestos abundantes en la envoltura (Figura tomada de [Cernicharo et al., 1999](#)).

La condensación de especies químicas refractarias en los granos de polvo da lugar al crecimiento de estos, pudiendo haber una población dependiente del tamaño del grano. La historia evolutiva de cada grano determina su tamaño, composición y, posiblemente, forma. La población que comúnmente se utiliza es la propuesta por [Jura \(1994\)](#).

$$n(a) \propto a^{-3.5} e^{-a/a_0}, \quad (1.5)$$

donde a es el radio de los granos de polvo y $a_0 \simeq 0.15 - 0.2 \mu\text{m}$ para IRC+10216. Esta población permite ajustar correctamente el continuo de la fuente ([Ivezić & Elitzur, 1996](#)).

La estructura de la componente de polvo de la CSE es bastante compleja. A partir de estudios realizados mediante técnicas interferométricas (Weigelt et al., 1998, 2002; Tuthill et al., 2000, 2005; Men'shchikov et al., 2002; Leão et al., 2006), ocultación lunar (Ridgway & Keady, 1988; Richichi et al., 2003), detección de luz Galáctica reflejada en la envoltura (Mauron & Huggins, 1999, 2000; Leão et al., 2006) o el uso de coronógrafos (Murakawa et al., 2002) se deduce que la existencia de asimetrías a todas las escalas. A gran escala se observa una acumulación de polvo en forma ligeramente toroidal y dos lóbulos brillantes en las regiones polares, donde la densidad de polvo es menor con la subsecuente reducción de la extinción (ver Figura 1.14). La disminución de la densidad de granos de polvo en

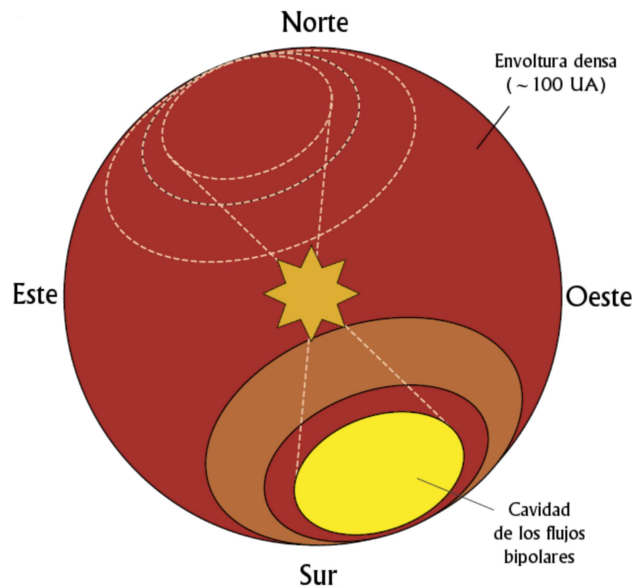


FIGURA 1.14.– Visión esquemática a gran escala de la envoltura de polvo de IRC+10216. La fuente comienza a presentar una estructura toroidal generada por asimetrías en la eyección de materia. Debido al descenso de la densidad de granos de polvo en los polos (zonas amarilla y opuesta) con respecto al ecuador se observa un incremento de emisión en esas regiones que se supone que están asociados a flujos bipolares poco intensos (Figura tomada de Men'shchikov et al., 2001).

la dirección de los polos permite que la radiación del IR cercano emitida por el entorno próximo a la estrella (el más caliente) escape de la envoltura interna. Los granos existentes en las zonas más alejadas de la estrella dispersan esta radiación mientras que en el plano del ecuador la atenuación es lo suficientemente grande como para que la mayor parte de los fotones sean absorbidos por el polvo.

Además, existen numerosas estructuras a pequeña escala, tanto en la envoltura externa como en la interna muy cerca de la estrella. Por medio de la detección de la luz ambiente Galáctica reflejada en la componente de polvo de la CSE, se observan irregularidades en la densidad de granos de polvo en forma de casquetes esféricos a diferentes distancias de la estrella y distribuidos en diferentes direcciones (ver Figura 1.6). Los grosores de estos casquetes varían entre los $0''.5$ y los $3''$, incrementándose con la distancia a la estrella de manera lineal. La extrapolación de la anchura en posiciones cercanas a la estrella indica que un casquete recién eyectado debería haber sido producido por un incremento en el flujo de materia durante unos 20 – 40 años. Los datos indican que estos episodios son periódicos y se producen cada 200 – 800 años. Como consecuencias de las diferentes velocidades de propagación de dichos casquetes y la pequeña distancia existente entre ellos en las regiones más internas de la envoltura, se piensa que podrían interaccionar entre ellos. La existencia

de dichas zonas de mayor densidad tienen como consecuencia la aparición de perfiles del tipo representado en la Figura 1.15. En la estructura interna existen grandes inhomogenei-

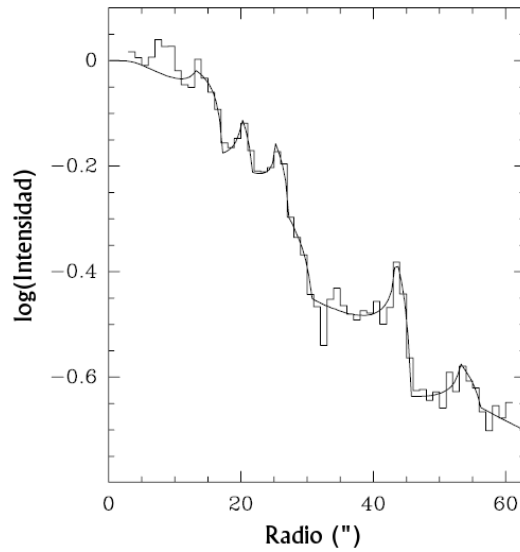


FIGURA 1.15.— Perfil de intensidad de la envoltura de polvo de IRC+10216. La Figura muestra el perfil de intensidad de la radiación ambiente Galáctica reflejada en la componente de polvo de la envoltura de IRC+10216 en la dirección del plano celeste a 214° y un ajuste a esos datos (Figura tomada de [Mauron & Huggins, 2000](#)).

dades (al menos 4 zonas más densas en los lóbulos) que evolucionan rápidamente con el tiempo y que deforman completamente la CSE en esta región, rompiendo la simetría esférica (ver Figura 1.16). Todavía no se conoce el origen de dichas irregularidades y el porqué

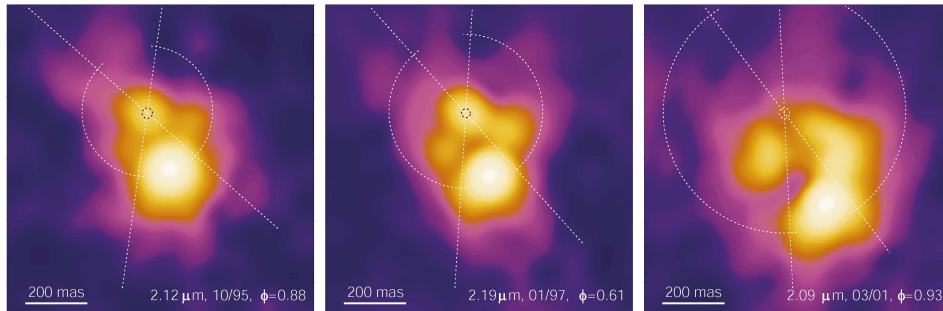


FIGURA 1.16.— Observaciones interferométricas del continuo de IRC+10216. En la Figura se comparan diferentes observaciones realizadas en 1995, 1997 y 2001 con fases $\phi = 0.88, 0.61$ y 0.93 y resoluciones espaciales de 92, 87 y 73 mas, respectivamente, en torno a $2.1 \mu\text{m}$. La CSE interna de IRC+10216 está en continua evolución pudiéndose ver los cambios en escalas de tiempo similares al periodo de pulsación de la estrella central (Figura tomada de [Men'shchikov et al., 2002](#)).

de la evolución en escalas de tiempo tan cortas (~ 1 año) aunque se sospecha que la estrella central de IRC+10216 podría ser en realidad un sistema binario, hipótesis que es apoyada por la existencia de los casquetes tratados anteriormente.

1.3. El caso de la PPN CRL618

La PPN CRL618, también llamada la nebulosa de Westbrook en honor a su descubridor (Westbrook et al., 1975), AFGL 618 o IRAS 04395+3601, es uno de los ejemplos más importantes de este tipo de objetos post-AGB. Desde su descubrimiento, muchos investigadores se han dedicado a estudiar su morfología, química y los mecanismos físicos que dan lugar a cambios tan extremos. Kwok & Bignell (1984) y Bujarrabal et al. (1988) sostienen que CRL618 entró en esta fase de su evolución hace tan sólo unos 100 – 200 años. La rápida variabilidad de esta fuente ha permitido la medida de un incremento en la luminosidad de unas 2 mag entre 1940 y 1974 ($0.06 \text{ mag año}^{-1}$; Gottlieb & Liller, 1976). Por lo tanto, se espera que CRL618 cambie rápidamente en los próximos cientos de años (Kwok & Bignell, 1984). Esta PPN carbonada está situada a una distancia de entre 0.9 y 1.8 kpc de la Tierra (Goodrich et al., 1991; Schmidt & Cohen, 1981; Knapp et al., 1993; Sánchez-Contreras et al., 2004b).

1.3.1. Estructura y propiedades físicas de CRL618

A grandes rasgos, CRL618 está compuesta por una estrella central de tipo B0V, rodeada de una región HII elíptica y ultracompacta con una densidad de polvo significativa (Westbrook et al., 1975; Calvet & Cohen, 1978; Kwok & Bignell, 1984). La temperatura de la estrella central es $T_{\text{eff}} \simeq 27000 - 32000 \text{ K}$ (Westbrook et al., 1975; Calvet & Cohen, 1978; Kaler, 1978; Knapp et al., 1993), y su masa y luminosidad $\simeq 0.8 M_{\odot}$ y $\simeq 1 - 4 \times 10^4 L_{\odot}$, respectivamente (Schmidt & Cohen, 1981; Goodrich et al., 1991; Knapp et al., 1993). La región HII, que está elongada en la dirección este-oeste ($0''.2 \times 0''.4$; Calvet & Cohen 1978; Wynn-Williams 1977; Kwok & Feldman 1981; Kwok & Bignell 1984), emite radiación continua de tipo libre-libre y presenta líneas de recombinación (Martín-Pintado et al., 1988) que pueden ser observadas a longitudes de onda centimétricas y milimétricas (Wynn-Williams, 1977; Kwok & Feldman, 1981; Knapp et al., 1993; Martín-Pintado et al., 1988, 1993, ver Figura 1.17). La temperatura electrónica crece desde los 8000 K en el centro de la región HII

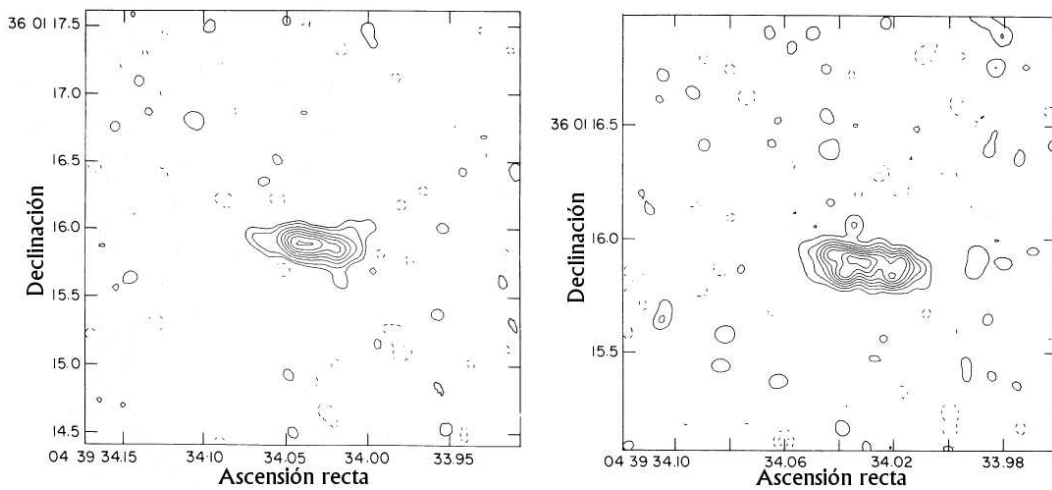


FIGURA 1.17.— Observaciones interferométricas de CRL618 realizadas con el VLA. Ambos mapas corresponden al continuo emitido por la región HII. El de la izquierda está tomado a 2 cm con un haz de $0''.12$ mientras que el mapa de la derecha muestra el continuo a 1.3 cm observado con un haz de $0''.07$ (Figura tomada de Kwok & Bignell, 1984).

hasta los 12000 K en una región que contiene a la frontera y tiene un grosor de unos $0''.020$ (Martín-Pintado et al., 1993). Además, se pueden observar líneas rovibracionales de H_2

(Beckwith et al., 1978) lo que sugiere la existencia de regiones compactas y neutras de alta densidad en el gas ionizado de la región HII. Las observaciones indican que esta región comenzó su formación hace tan sólo entre 30 y 60 años (Knapp et al., 1993).

En torno a la región HII se observa una envoltura toroidal en expansión compuesta por gas en forma molecular y una gran cantidad de polvo (ver Figura 1.18). Por último,

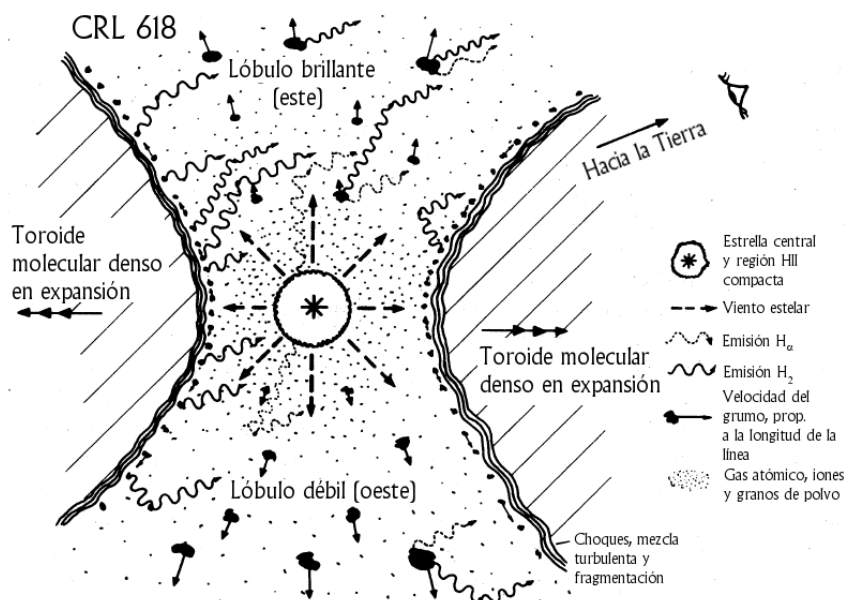


FIGURA 1.18.— Visión esquemática de la estructura de CRL618. La Figura representa un corte de CRL618 donde se puede ver cómo la región HII ocupa el centro de la fuente. La radiación emitida por esta región es capaz de formar flujos bipolares que se expanden a una velocidad de $\approx 200 \text{ km s}^{-1}$ en la dirección perpendicular al toro y están compuestos por gas, polvo y grumos de gas neutro (dibujados como manchas negras), que en ocasiones son arrancados de las paredes del toro. Éste está formado por gas denso con una componente ópticamente opaca de polvo y se expande a $\approx 20 \text{ km s}^{-1}$. La radiación generada en la zona cercana a la región HII es dispersada por los granos de polvo en los lóbulos formados por los flujos bipolares, siendo posible su detección (Figura tomada de Burton & Geballe, 1986).

toda esta estructura está contenida en una envoltura esférica extensa ($> 20''$) y enrarecida con una masa total $\approx 1 M_{\odot}$, que se expande lentamente con una velocidad de entre 17.5 y 19 km s^{-1} (Knapp & Morris, 1985; Bujarrabal et al., 1988, 2001; Knapp et al., 1993). Se cree que esta envoltura son los restos de la CSE de la estrella AGB progenitora de esta nebulosa protoplanetaria.

En el rango del óptico es posible observar dos lóbulos compuestos por gas excitado por choques. En realidad, los lóbulos están formados por varios flujos bipolares de alta velocidad colimados por el toro denso molecular que se expanden en la dirección perpendicular a él (más o menos, la dirección este-oeste) y con una inclinación de $30 - 45^{\circ}$ con respecto al plano del cielo (Calvet & Cohen, 1978; Cernicharo et al., 1989, 2001a; Trammel, 2000; Sánchez-Contreras et al., 2002, 2004a,b; Pardo et al., 2005), siguiendo más o menos la dirección determinada por la elongación de la región HII (ver Figura 1.19). Su densidad es menor que la de los restos de la CSE de la estrella AGB progenitora, con una masa total estimada de $\approx 10^{-2} M_{\odot}$. Se extienden hasta alcanzar los $3''$ expandiéndose a velocidades de hasta 200 km s^{-1} . (Knapp & Morris, 1985; Bujarrabal et al., 1988; Neri et al., 1992; Cernicharo et al., 1989, 2001b; Sánchez-Contreras et al., 2004a,b; Pardo et al., 2005; Trammel, 2000). Las teorías aceptadas proponen que estos flujos son la consecuencia de la interac-

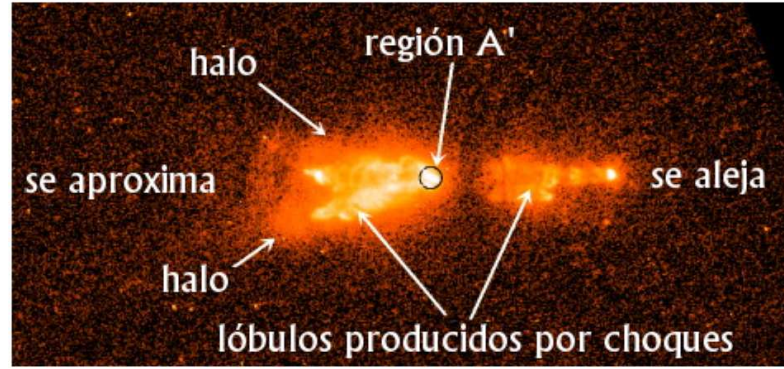


FIGURA 1.19.— Lóbulos de CRL618 observados en la línea H_α y el continuo con el instrumento WFPC2/HST. La resolución angular de la imagen es de $0''.0455 \text{ pixel}^{-1}$. Se cree que la región A' es la zona externa de la región HII, donde aproximadamente todos los átomos están ionizados por la acción del campo de radiación estelar (Figura tomada de [Sánchez-Contreras et al., 2002](#)).

ción entre un viento post-AGB rápido y colimado y de varias regiones compactas en la CSE interna que se expanden lentamente ([Calvet & Peimbert, 1983](#); [Sahai & Trauger, 1998](#); [Kastner & Gatley, 2000](#); [Sánchez-Contreras et al., 2002](#); [Lee & Sahai, 2003](#); [Balick, 1987](#)). Esta conclusión es apoyada por las observaciones de [Martín-Pintado et al. \(1993\)](#), que indican la presencia de estructuras densas a pequeña escala en los flujos bipolares de alta velocidad.

1.3.2. Química en CRL618

Hasta el momento se ha determinado que el gas que compone la envoltura de este objeto está contiene una gran cantidad de especies moleculares ([Cernicharo et al., 1989, 2001b](#); [Herpin & Cernicharo, 2000](#); [Remijan et al., 2005](#); [Truong-Bach et al., 1996](#)), algunas de ellas detectadas por primera vez en el medio circunestelar, como en el caso de los poliínos diacetileno y triacetileno ([Cernicharo et al., 2001a](#), ver Figura 1.20). El C_2H_2 es fotodisociado

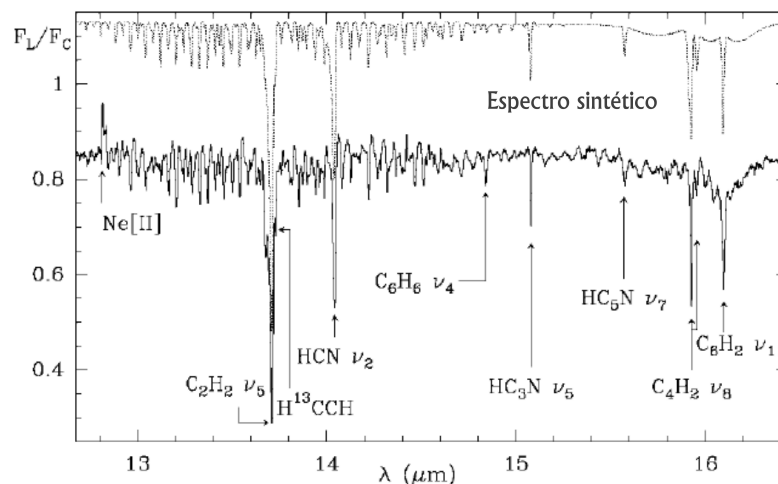


FIGURA 1.20.— Espectro infrarrojo de CRL618 tomado con SWS/ISO. Se observan claramente bandas en absorción de varias especies moleculares como son los poliínos C_4H_2 y C_6H_2 , los cianopoliínos HC_3N y HC_5N y el benceno (C_6H_6). En la figura se incluye un ajuste al espectro observado obtenido mediante la aplicación del código LVG desarrollado por J. Cernicharo (Figura tomada de [Cernicharo et al., 2001a](#)).

en la región más interna de la CSE por el campo de radiación UV generado por la nueva estrella central para dar lugar a C_2H , que puede llegar a alcanzar abundancias tan grandes como el propio C_2H_2 . Los modelos de cinética química nos enseñan que estas cadenas carbonadas son el producto de un proceso de polimerización mediante la reacción química $C_2H + C_{2m}H_2 \rightleftharpoons C_{2+2m}H_2 + H$, con $m = 1, 2$ y $k = 2.7 \times 10^{-10} (T/300)^{-0.43} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ para $T > 300 \text{ K}$, alcanzándose los picos de abundancia para las especies con mayor proporción de átomos de carbono en las zonas neutras (Cernicharo, 2004a). Como el tiempo químico de las reacciones de polimerización es menor que el tiempo de evolución de la región HII, la química puede llegar al equilibrio con razones de abundancia entre poliínos consecutivos (C_2H_2 , C_4H_2 , C_6H_2 , ...) de entre 2 – 3 (Cernicharo et al., 2001a). Es decir, CRL618 debe su riqueza química en gran medida a la atenuación producida por el toro, que en la zona más interna presenta abundancias $\sim 10^7 - 10^9 \text{ cm}^{-3}$ (Cernicharo et al., 2001b; Woods et al., 2005).

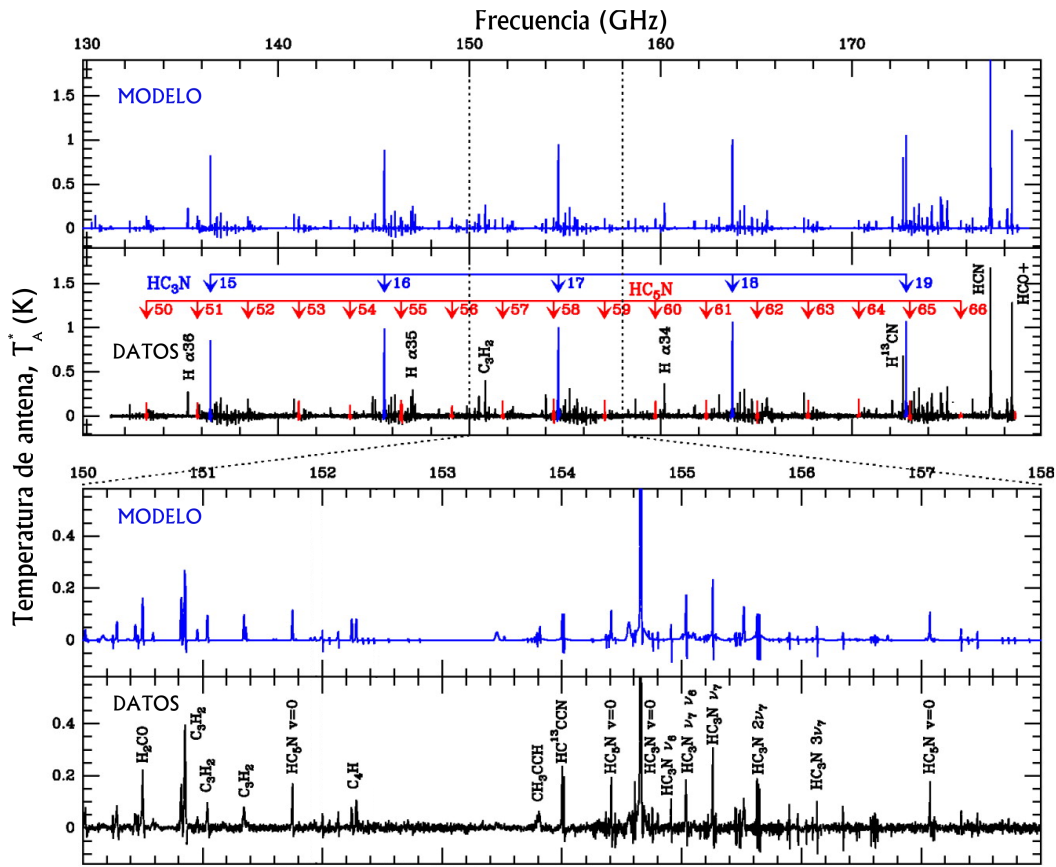


FIGURA 1.21.— Muestra del espectro de radiofrecuencias de CRL618 tomado con el telescopio de 30 m de IRAM. El espectro presenta una estructura en forma de grupos de líneas de HC_3N en diferentes estados vibracionales. Además, se pueden ver líneas de otras moléculas como HC_5N , CH_3CCH y H_2CO . La figura incluye el ajuste a los datos observacionales mediante el modelo de CRL618 desarrollado por J. R. Pardo (Figura tomada de Pardo & Cernicharo, 2007).

Junto con el C_2H_2 , el HCN también queda fotodisociado en la PDR generando iones CN , que a través de la reacción química $C_nN + C_mH_2 \rightleftharpoons HC_{n+m}N + H$ con una $k \simeq 2 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, dan lugar a los cianopoliínos ($HC_{2n+1}N$, $n = 1, 2, \dots$) de manera bastante eficiente. Existen varios representantes de esta serie bastante abundantes, habiéndose detectado todos los existentes hasta HC_7N incluido. La densidad de columna estimada para el

HC_3N es de $2.0 - 3.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ mientras que la razón de abundancias $[\text{HC}_3\text{N}]/[\text{HC}_5\text{N}]$ y $[\text{HC}_5\text{N}]/[\text{HC}_7\text{N}]$ es $\simeq 3 - 6$, dependiendo de si se observa el toro o la CSE-AGB (Wyrowski et al., 2003; Pardo et al., 2004b, 2005).

Es importante señalar que, a pesar de que la abundancia de los radicales C_2H y CN parece ser bastante grande, no se detectan trazas de ellos en los espectros. Este hecho indica que participan en reacciones químicas muy rápidas desapareciendo inmediatamente después de formarse (Pardo & Cernicharo, 2007).

Además de los poliínos y cianopoliínos, el espectro infrarrojo de CRL618 muestra una gran cantidad benceno, etileno y metilpoliínos, produciéndose estos últimos más eficientemente en CRL618 que en IRC+10216 (Cernicharo et al., 2001a,b). Por otro lado, Pardo et al. (2005) indican que las especies CH_3CCH y CH_3CN se detectan tanto en el toro como en la CSE-AGB. Aparte de las anteriores, existe una gran cantidad de especies moleculares tanto en el toro como en la CSE-AGB y de las que no hablaremos en mayor profundidad ya que nos apartaríamos de nuestro objetivo. Algunas moléculas observadas son C_3H_2 , $c\text{-C}_3\text{H}$, C_4H , MgNC , N_2H^+ y, por supuesto, moléculas oxigenadas como H_2CO , SiO , HCO^+ y CO , que se extiende hasta los $17''$ (Pardo & Cernicharo, 2007, ver Figura 1.21).

Capítulo 2

Espectroscopía Molecular

Desde la primera detección de emisión molecular extraterrestre (Huggins, 1882), la utilización de transiciones moleculares en los estudios astronómicos ha ido aumentando progresivamente hasta convertirse en una herramienta esencial para el astrónomo. En especial, dos de los tres espectros estudiados durante este trabajo contienen una densidad de líneas típica de la estructura ro-vibracional de las moléculas lineales, que permite determinar condiciones físicas con gran precisión. El correcto manejo de esta herramienta sería imposible sin el estudio y la comprensión de los fenómenos cuánticos que se dan en los sistemas moleculares. Hay muchos y buenos textos de Física Molecular (por ejemplo Herzberg I, 1989; Herzberg II, 1989) que permitirán (y en mi caso me han permitido) al lector alcanzar el nivel de comprensión adecuado. Es por ello por lo que en este Capítulo expondremos los conocimientos necesarios para la correcta interpretación de los datos observacionales.

Las moléculas más abundantes existentes en la envoltura de IRC+10216 son, por este orden, CO, C₂H₂, HCN, SiS y SiO (ver, por ejemplo Keady & Ridgway, 1993, y la Sección 1.1.4). Por otra parte, las moléculas C₄H₂ y C₆H₂ son mucho más abundantes en la PPN CRL618. Concretamente los espectros que hemos estudiado contienen una gran cantidad de líneas de las anteriores especies moleculares y sus principales isotopómeros, por lo que nos es necesario conocer la estructura de niveles de energía y los parámetros cuánticos de estas moléculas para poder identificar las líneas detectadas y obtener las intensidades correctas en el espectro sintético. Las moléculas que vamos a tratar en este trabajo son todas lineales y por ello, tendrán comportamientos similares. Aún así, existen diferencias importantes entre ellas debido a su diferente grado de simetría.

A lo largo de la Tesis hablaremos, por un lado, de las llamadas *cadenas poliacetilénicas* o *poliinos* (C_{2n}H₂, $n = 1, 2, \dots$) y de algunos de sus isotopómeros y, por otro, del HCN (*cianuro de hidrógeno*, que es la especie más sencilla de los *cianopoliinos* – HC_{2n-1}N, $n = 1, 2, \dots$) y los suyos. Sin embargo, durante la exposición de la teoría sobre las moléculas lineales, únicamente nos centraremos en los poliinos con el C₂H₂ y H¹³CCCH como representantes de todas las especies poliatómicas que nos interesan, sin pérdida de generalidad para el resto¹, aunque haciendo mención más o menos constantemente a las otras moléculas.

2.1. Moléculas lineales

La primera aproximación al tratamiento cuántico de las moléculas considera que éstas son sistemas formados por elementos puntuales unidos rígidamente entre ellos. Esta es la llamada *aproximación del rotor rígido* y permite el estudio preciso de la rotación molecular para niveles rotacionales con poca energía. Con esta formulación se pueden clasificar las

¹El C₂H₂ o HCCH es una molécula lineal y dotada de una estadística de espín que genera una especie *orto* y otra *para*. Por otro lado, la molécula H¹³CCCH es similar a HCCH pero no presenta ninguna estadística de espín debido a su falta de simetría. El estudio de estos ejemplos nos permitirá aplicar todo lo aprendido al resto de las especies acetilénicas, a sus isotopómeros y al HCN y los suyos.

moléculas en tres tipos distintos dependiendo de la forma en la que rotan. Así tenemos los llamados *trompos esféricos*, *trompos simétricos* y *trompos asimétricos*. Un trompo esférico es aquel cuerpo cuyo elipsoide de inercia es una esfera, es decir, los momentos de inercia en las direcciones principales (a partir de aquí hablaremos de “momentos de inercia” simplemente) son todos iguales. Un molécula perteneciente a este grupo es, por ejemplo, el SF_6 . Los trompos simétricos son aquellos cuerpos cuyo elipsoide de inercia es un elipsoide de revolución. De este modo, tiene dos momentos de inercia iguales y uno distinto. Dependiendo de si este último momento es mayor o menor que los otros dos, tendremos que el trompo simétrico es *oblate* o *prolate*². Un ejemplo de trompo simétrico oblate es C_6H_6 y uno prolate, CH_3CCH . El caso de las moléculas lineales es un caso especial de trompo simétrico oblate en el que el momento de inercia a lo largo del eje de la molécula es nulo. Los trompos asimétricos son aquellos cuerpos cuyo elipsoide de inercia no es de revolución y sus momentos de inercia son todos distintos. Las moléculas que pertenecen a este conjunto son las más complicadas de estudiar, llegando esta complejidad hasta el punto de no poderse encontrar un conjunto completo de buenos números cuánticos que representen adecuadamente los niveles de energía. Afortunadamente, a lo largo de esta Tesis hablaremos únicamente de trompos simétricos, para los que sí es posible encontrar ese conjunto completo de números cuánticos.

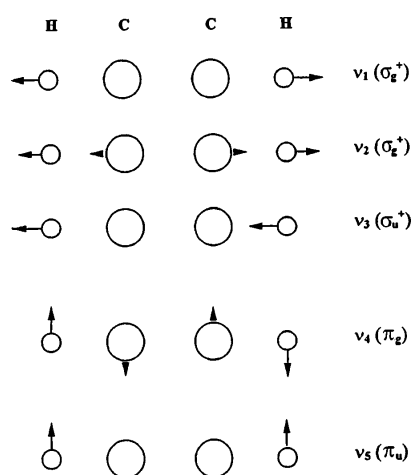


FIGURA 2.1.— Modos de vibración del C_2H_2 e isotopómeros. Todos los movimientos vibracionales del sistema son combinaciones lineales de estos modos fundamentales de vibración. Para ver el proceso mecano-cuántico de obtención de frecuencias de vibración ver, por ejemplo, [Levine \(1975, Cap. 6\)](#) (Figura tomada de [Herman et al., 2003](#)).

Dadas las condiciones físicas reinantes en la envoltura de IRC+10216 y de CRL618, que se caracterizan por tener temperaturas y densidades intermedias o pequeñas, podemos considerar que no hay transiciones electrónicas (todas las moléculas están en el estado electrónico fundamental) y sólo es posible la observación de transiciones rovibracionales (y rotacionales puras en aquellos isotopómeros con momento dipolar permanente).

Los modos de vibración moleculares del acetileno son los representados en la Figura 2.1. Estos modos, sus estados excitados y sus combinaciones lineales dan lugar a los movimientos vibracionales moleculares. La notación inicial (la completaremos más adelante) que se

²Palabras procedentes del inglés. Un cuerpo es *prolate* si puede ser generado a partir de la rotación de una elipse en torno a su eje mayor. Por otro lado, un cuerpo es *oblate* si puede ser generado mediante la rotación de una elipse en torno a su eje menor. No confundir con la palabra española *oblongo* que significa más largo que ancho, es decir, *prolate*.

suele utilizar para designar un nivel genérico tiene la forma,

$$v_1\nu_1 + v_2\nu_2 + v_3\nu_3 + v_4\nu_4^{\ell_4} + v_5\nu_5^{\ell_5}, \quad (2.1)$$

donde los coeficientes v_i son los niveles vibracionales del modo i -ésimo que forman un nivel dado y los números ℓ_4 y ℓ_5 indican el momento angular vibracional asociado a cada uno de los modos de flexión (ver Sección 2.1.1). El conjunto de los n modos normales de vibración $\{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n\}$ se puede dividir en dos distintos que contienen a los modos de tensión o *stretching*, con n_s elementos, y a los modos de flexión o *bending*, con n_b elementos. Para el caso de cualquier molécula poliatómica lineal, los niveles de energía se pueden escribir como:

$$\sum_{i=1}^{n_s} v_i \nu_i + \sum_{j=n_s+1}^{n_s+n_b} v_j \nu_j^{\ell_j}. \quad (2.2)$$

A los niveles vibracionales que se describen mediante un sólo sumando y cuyo número cuántico asociado $v_i = 1$ se les llama *niveles fundamentales*. Aquellos niveles que se pueden escribir mediante un sólo sumando y un coeficiente distinto de 1, se les llama *sobretonos*, mientras que a los niveles que se han de escribir haciendo uso de más de un sumando se les llama *niveles de combinación* (ver Figura 2.2).

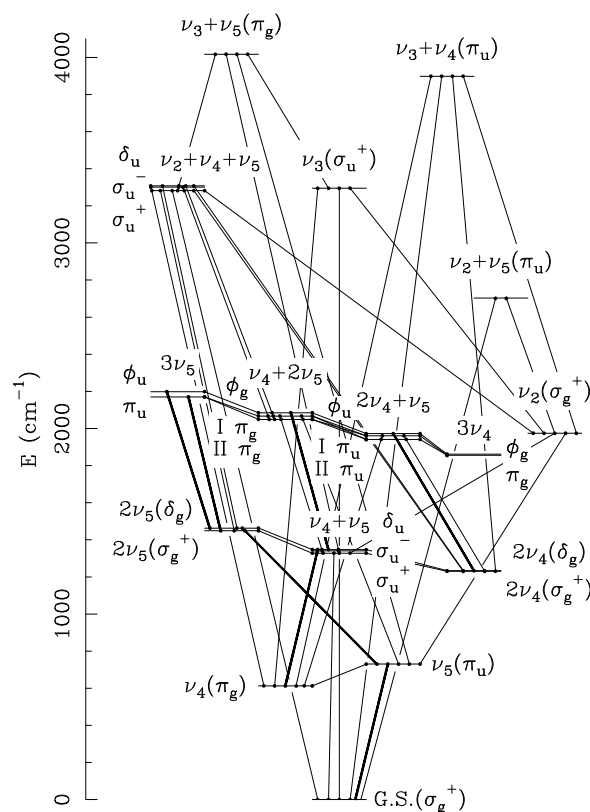


FIGURA 2.2.— Niveles vibracionales del acetileno. En esta figura se muestran los niveles vibracionales (con J mínimo) hasta los 4000 cm^{-1} . También se han dibujado las transiciones posibles entre los estados considerados con líneas negras delgadas y las transiciones observadas en IRC+10216 con los instrumentos TEXES/IRTF entre 11 y $14 \mu\text{m}$ con líneas negras gruesas (ver Sección 4).

2.1.1. El momento angular vibracional

En las moléculas lineales con más de dos átomos se produce un fenómeno de rotación en torno al eje molecular debido a la vibración molecular. En el ejemplo del acetileno y sus isotopómeros, la molécula está formada por 4 átomos y es lineal. Según la mecánica clásica, el número de modos normales de vibración, n , asociados a un sistema de 4 partículas enlazadas linealmente es de 7, con $n_s = 3$ modos de tensión y $n_b = 4$ de flexión³. Los cuatro modos de flexión están degenerados dos a dos (pues hay un modo normal por cada dirección espacial perpendicular al eje molecular) por lo que existen únicamente 5 modos vibracionales, dos de ellos doblemente degenerados. Este resultado se puede generalizar fácilmente, dando lugar a que $n_s + 2n_b^* = n$ y que $n_s = n_b^* + 1$, donde n_b^* indica el número de modos de flexión teniendo en cuenta la degeneración ($n_b^* = n_b/2$). Resolviendo el sistema y expresando el resultado en función del número de átomos de la molécula lineal, N , tenemos que $n_s = N - 1$ y $n_b^* = N - 2$. A partir de ahora siempre que hablemos de modos de flexión nos referiremos a los que incluyen la degeneración, es decir, a n_b^* .

Los modos degenerados en el caso del acetileno son ν_4^a y ν_4^b y ν_5^a y ν_5^b (para simplificar ν_i^a y ν_i^b). Cuánticamente, como ν_i^a y ν_i^b tienen la misma energía, una combinación lineal de los anteriores autoestados es también autoestado. Así pues, resulta que el modo vibracional de flexión i -ésimo, siendo $i = 4, 5$, es axialmente simétrico y, por lo tanto, existe una cantidad conservada que es un momento angular paralelo al eje de la molécula y viene representado por el número cuántico ℓ_i . Estos modos vibracionales axialmente simétricos han de cumplir una restricción: el número cuántico ℓ_i puede tomar únicamente los valores $-v_i, -v_i + 2, \dots, v_i - 2, v_i$.

Para un nivel vibracional de combinación con ℓ_4 y ℓ_5 , las proyecciones del momento angular vibracional total, ℓ , sobre el eje molecular son $m_\ell = -\ell_4^{\max} - \ell_5^{\max}, -\ell_4^{\max} - \ell_5^{\max} + 2, \dots, \ell_4^{\max} + \ell_5^{\max} - 2, \ell_4^{\max} + \ell_5^{\max}$. Debido a ello, el momento angular vibracional total toma los valores

$$\ell = \ell_4^{\max} + \ell_5^{\max}, \ell_4^{\max} + \ell_5^{\max} - 2, \dots, \begin{cases} 1 & \text{si } \ell^{\max} \text{ impar} \\ 0 & \text{si } \ell^{\max} \text{ par} \end{cases}, \quad (2.3)$$

siendo $\ell^{\max} = \ell_4^{\max} + \ell_5^{\max}$. La manera de estándar de representar el momento angular vibracional total es mediante el uso de letras griegas, tomando las mismas equivalencias que para los orbitales atómicos: $\ell = 0 \equiv \sigma$, $\ell = 1 \equiv \pi$, $\ell = 2 \equiv \delta$, $\ell = 3 \equiv \phi$, etc. Dependiendo del texto (o artículo) que se lea, se puede encontrar que las letras griegas usadas son mayúsculas o minúsculas. Nosotros adoptaremos el convenio de que las minúsculas se refieren a los momentos angulares vibracionales y las mayúsculas a los momentos angulares electrónicos.

2.1.2. Simetrías y paridades

Es posible dar más información útil de cada nivel presentando la *paridad* del nivel en su forma usual⁴, representada a través del operador \hat{P} y definida como:

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{n_e}, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{n_n}) = \psi(-\mathbf{r}_1, \dots, -\mathbf{r}_{n_e}, -\mathbf{R}_1, \dots, -\mathbf{R}_{n_n}), \quad (2.4)$$

donde $\{\mathbf{r}_i\}_{i=1}^{n_e}$ son los vectores posición de los n_e electrones y $\{\mathbf{R}_j\}_{j=1}^{n_n}$ son los vectores posición correspondientes a los n_n núcleos. Si existe algún tipo de paridad, ésta debe ser $+$ o $-$. Además, también se puede dar el valor de la *paridad con respecto al plano medio molecular*,

³Según la teoría clásica de las pequeñas vibraciones, el número de modos normales de vibración o grados de libertad, n , que tiene un sistema de N partículas es $3N - 6$ para cualquier sistema excepto para los lineales que es $3N - 5$. En ese número de modos también se incluyen los modos degenerados, que deberán ser identificados más tarde.

⁴En esta Tesis sólo consideraremos moléculas en el nivel electrónico fundamental y con paridad de la función de onda electrónica positiva. Aquella que aparece en los niveles que utilizemos está referida solamente al sistema nuclear y a la estructura rotacional.

representada mediante el operador \hat{P}_M . Ésta última consiste en una reflexión con respecto al plano medio molecular, esto es, un giro de 180° con respecto al eje perpendicular al plano de la vibración y contenido en el plano medio molecular⁵. Se define como:

$$\hat{P}_M \psi(\mathbf{x}_1, z_1, \dots, \mathbf{x}_{n_e}, z_{n_e}, \mathbf{X}_1, Z_1, \dots, \mathbf{X}_{n_n}, Z_{n_n}) = \psi(-\mathbf{x}_1, z_1, \dots, -\mathbf{x}_{n_e}, z_{n_e}, -\mathbf{X}_1, Z_1, \dots, -\mathbf{X}_{n_n}, Z_{n_n}) \quad (2.5)$$

siendo $\{\mathbf{r}_i = (\mathbf{x}_i, z_i)\}_{i=1}^{n_e}$, $\{\mathbf{R}_j = (\mathbf{X}_j, Z_j)\}_{j=1}^{n_n}$ y tomando el eje de rotación en la dirección del eje z . Puede tener dos valores que se representan mediante el uso de las palabras alemanas para par, *gerade* (g), e impar, *ungerade* (u). Geométricamente hablando, es muy útil el indicar que los estados *gerade* son aquellos cuyo movimiento vibracional se mantiene igual al girar 180° la molécula y los *ungerade* aquéllos cuyo movimiento de vibración queda invertido con respecto al movimiento inicial (véase los modos $\nu_4(\pi_g)$ y $\nu_5(\pi_u)$ del acetileno como ejemplos de modo *gerade* y *ungerade*, respectivamente; Figura 2.1).

Así, una expresión más adecuada para un nivel vibracional genérico es:

$$v_1\nu_1 + v_2\nu_2 + \dots + v_{n-1}\nu_{n-1} + v_n\nu_n(\ell_{g,u}^\pm). \quad (2.6)$$

En la Figura 2.2 vemos que varios niveles σ están desdoblados en el σ^+ y el σ^- , como por ejemplo $\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+)$ y $\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-)$, mientras otros como $2\nu_5(\sigma_g^+)$ o $\nu_3(\sigma_u^+)$ sólo son σ^+ . Es necesario decir que el número cuántico rotacional total, J , no puede ser menor que ℓ en el nivel electrónico fundamental para el modo de flexión vibracional considerado pues J contiene la contribución de todos los momentos angulares existentes en la molécula. Así pues, $J = \ell, \ell + 1, \ell + 2, \dots$

El momento angular vibracional total interacciona con el momento angular total molecular desdoblándose los niveles vibracionales distintos de σ en un nivel par y otro impar a través de la fuerza de Coriolis. En el caso de que el momento angular molecular total sea distinto de cero, el momento de inercia de la molécula depende de la dirección de oscilación del modo de flexión considerado, generando una diferencia energética rotacional entre los dos casos y desdoblado el nivel inicial. Los niveles σ representan niveles con $\ell = 0$ y pueden ser de dos tipos: aquéllos cuyo momento angular vibracional está formado por la suma de varios momentos angulares vibracionales nulos y aquéllos cuyo momento angular vibracional es nulo porque la suma de los momentos angulares vibracionales de los modos que lo forman vale 0, sin ser estos últimos iguales a 0. Los niveles que pertenecen al primer grupo no están desdoblados (como por ejemplo, el nivel fundamental) mientras que los que pertenecen al segundo grupo sí lo están en σ^+ y σ^- . Un ejemplo de estos niveles σ desdoblados es el ya mencionado par $\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+)$ y $\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-)$ del C_2H_2 . En cuanto a la paridad de cada uno de estos niveles desdoblados depende de la paridad de las funciones de onda vibracional y rotacional, puesto que el estado electrónico fundamental tiene simetría par para las moléculas que nos interesan. En consecuencia, para cada nivel vibracional tenemos una serie de niveles rotacionales desdoblados en niveles con distinta paridad (ver Figura 2.3).

A partir de los niveles desdoblados obtenidos, es posible construir otros distintos más adecuados para la consideración del momento angular vibracional total de un nivel de combinación. Así introducimos la paridad e y f . Los nuevos niveles dan lugar a una nueva base de autoestados y son a su vez autoestados del operador de paridad E^* , definido como:

$$E^* |\nu_4^{\ell_4} \nu_5^{\ell_5} \ell J\rangle = (-1)^{J-\ell} |\nu_4^{-\ell_4} \nu_5^{-\ell_5} - \ell J\rangle. \quad (2.7)$$

Se define el estado e como aquél que cumple que:

$$|\nu_4^{\ell_4} \nu_5^{\ell_5} \ell J e\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\nu_4^{\ell_4} \nu_5^{\ell_5} \ell J\rangle + |\nu_4^{-\ell_4} \nu_5^{-\ell_5} - \ell J\rangle \right] \quad (2.8)$$

⁵Esta simetría la presentan todos los poliinos que estamos estudiando excepto el H^{13}CCH .

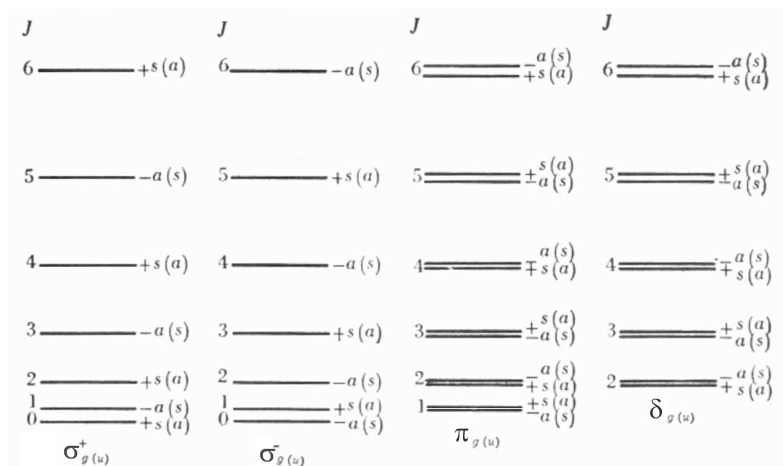


FIGURA 2.3.– Niveles rotacionales del C_2H_2 dependiendo del valor del momento angular vibracional. Podemos apreciar la existencia de los dobletes para los niveles vibracionales π y δ y como la separación aumenta con J . A la derecha de las estructuras de niveles se indica la paridad de cada nivel y si es simétrico o antisimétrico con respecto a la reflexión en el plano medio molecular en un nivel vibracional g . Entre paréntesis se muestra la simetría del nivel en el caso de tener un nivel vibracional u (Figura tomada de Herzberg II, 1989).

y el f como

$$|\nu_4^{\ell_4} \nu_5^{\ell_5} \ell J f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\nu_4^{\ell_4} \nu_5^{\ell_5} \ell J\rangle - |\nu_4^{-\ell_4} \nu_5^{-\ell_5} - \ell J\rangle \right]. \quad (2.9)$$

Según estas definiciones, e es el estado par mientras que f es el impar. En cuanto a los niveles vibracionales con $\ell = 0$, el σ^+ es el e mientras que el σ^- es el f .

La diferencia energética entre los niveles desdoblados depende del estado vibracional y del número rotacional J , aumentando con éste. Esta diferencia es entre 200 y 300 veces más pequeña que la constante rotacional para el C_2H_2 y el HCN. Pero a pesar de ser tan pequeña, es posible observarla en espectros de gran resolución espectral como veremos a lo largo de esta Tesis.

2.1.3. Bandas, ramas y subramas

Cada estado vibracional contiene un gran número de niveles rotacionales con una paridad determinada. Las transiciones rovibracionales se producen entre dos niveles rotacionales de dos estados vibracionales distintos. Al conjunto de todas las transiciones rovibracionales existentes entre dos estados vibracionales se le llama *banda*. Si la banda se produce entre un nivel fundamental y el estado fundamental, se dice que es una *banda fundamental*. Si los niveles involucrados son un nivel fundamental y un sobretono o dos sobretonos del mismo modo vibracional, a la banda se le llama *sobretono*. Si la transición se produce entre un nivel de combinación y el estado fundamental, se dice que es una *banda de combinación*. Por último, si alguno de los niveles involucrados en la transición (o los dos) es un nivel de combinación y el estado vibracional inferior no es el estado fundamental, se habla de *banda caliente*. La cantidad de transiciones que contiene una banda está directamente determinada por las *reglas de selección*, que veremos en la Sección 2.1.5. En esta Sección también veremos que para las transiciones rovibracionales la regla de selección referente al cambio de número cuántico J establece que $\Delta J = 0, \pm 1$, siendo $\Delta J = J_{\text{sup}} - J_{\text{inf}}$. De este modo se pueden definir las *ramas*, que son los conjuntos de transiciones de una banda dada que cumplen que ΔJ es igual a uno de esos tres números. Si $J_{\text{sup}} = J_{\text{inf}} + 1$ tenemos la *rama R*, si $J_{\text{sup}} = J_{\text{inf}}$ la *rama Q* y si $J_{\text{sup}} = J_{\text{inf}} - 1$, la *rama P*. Dependiendo de si los niveles superior

e inferior están o no desdoblados (tienen $\ell = 0$ o $\ell \neq 0$), las ramas (P, Q y R) pueden a su vez tener *subramas* caracterizadas por la paridad e o f de los niveles involucrados en las transiciones. El modo usual de nombrar la cada subrama a la que pertenece una transición dada es indicando la rama y la paridad e o f del nivel inferior involucrado en la transición a modo de subíndice.

Utilizando todo lo anterior, podemos introducir fácilmente la notación adoptada a lo largo de la Tesis considerando siempre transiciones en emisión:

$$[v_1\nu_1 + \cdots + v_n\nu_n (\ell_{g,u}^{\pm})]_{\text{sup}} - [v_1\nu_1 + \cdots + v_n\nu_n (\ell_{g,u}^{\pm})]_{\text{inf}} B_{e,f} (J_{\text{inf}}), \quad (2.10)$$

donde B es la rama en cuestión, el subíndice “sup” se refiere al nivel superior e “inf” al nivel inferior. Si la paridad \pm no aparece, entonces nos estamos refiriendo a ambas a la vez. Por otro lado, si no aparece la simetría $g-u$ se entiende que la molécula no es simétrica con respecto al plano medio molecular. En algunos casos pueden aparecer niveles vibracionales distintos de combinación con el mismo identificador debido a que esta notación no es del todo unívoca. En estos casos, se utilizan números romanos en mayúsculas en sentido de energía decreciente para nombrar a cada uno de estos niveles.

2.1.4. Degeneración

Se puede escribir la degeneración de un nivel rotacional J con simetría S en un nivel vibracional dado como $g_{[v]\ell JP} = g_{IJP}^S g_{[v]\ell}^V g_{JP}^R$, donde g_{IJP}^S es la degeneración por la estadística de espín cuando el espín nuclear total vale I y el nivel rotacional es J con paridad P ⁶, $g_{[v]\ell}^V$ es la degeneración del nivel vibracional determinado por el conjunto de números cuánticos vibracionales $[v]$ y con un número cuántico ℓ dado, siendo $[v] = (v_1 v_2 \cdots v_{n-1} v_n)$, y g_{JP}^R la degeneración rotacional del nivel J con paridad P .

En una molécula poliatómica heteronuclear como es el caso del acetileno y sus isotopómeros simétricos con respecto al plano medio molecular ($^{12}\text{C}_2\text{H}_2$, $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$, $^{12}\text{C}_2\text{D}_2$, $^{12}\text{C}_2\text{T}_2$, ...) la degeneración debida al espín no es 1. El C_2H_2 tiene dos átomos de ^{12}C y dos de ^1H con espines nucleares $I(^{12}\text{C}) = 0$ e $I(^1\text{H}) = 1/2$. Según el acoplamiento entre momentos angulares, el espín nuclear total de la molécula puede ser $I = 0$, con lo que tendremos el *para*-acetileno, o $I = 1$, correspondiente al *orto*-acetileno. Cada nivel J con paridad P en un nivel vibracional $[v]\ell$ tiene una degeneración de espín $g_{IJP}^S = 2I + 1$ con las especificaciones relativas al nivel rovibracional $[v]\ell J$ debido a su paridad. Al considerar que los niveles vibracionales están desdoblados, la degeneración $g_{[v]\ell}^V$ es siempre 1, aunque la simetría del estado vibracional interviene en el valor de la degeneración del espín. Para el nivel rotacional J con paridad P la degeneración es $g_{JP}^R = 2J + 1$, pues esa degeneración no depende de la paridad del nivel rotacional. Pero como la función de onda total ha de ser antisimétrica hemos de tener en cuenta la función de onda de espín nuclear, quedando modificada la anterior expresión para $g_{[v]\ell JP}^R$. Para el $^{12}\text{C}_2\text{H}_2$, cuando $I = 1$, la función de onda nuclear de espín es simétrica y sólo pueden existir los niveles rotacionales impares, mientras que cuando $I = 0$ es antisimétrica y sólo pueden existir los rotacionales pares. Así pues,

$$g_{[v]\ell JP} = g_{IJP}^S g_{[v]\ell}^V g_{JP}^R = (2J + 1) \begin{cases} g_a & \text{si } P = -1 \text{ (impar)} \\ g_s & \text{si } P = 1 \text{ (par)} \end{cases}, \quad (2.11)$$

donde g_a y g_s son los valores proporcionados por la función de onda nuclear para el estado con $[v]\ell J$ antisimétrico y simétrico, respectivamente. La Tabla 2.1 resume (y añade las simetrías g , u y las paridades e y f) las degeneraciones debidas al espín escribiendo explícitamente las simetrías. Como ejemplo, veremos que un estado rotacional con J par en el estado vibracional fundamental (es *gerade* y sólo contiene estados rotacionales e por ser

⁶Como la función de onda total molecular ha de ser antisimétrica, la molécula no puede tener todos los valores de J posibles: están prohibidos los J impares cuando la función de onda nuclear es impar ($I = 0$, $|\uparrow\downarrow\rangle$), para el C_2H_2 y los J pares cuando la función de onda nuclear es par ($I = 1$, $|\uparrow\uparrow\rangle$), para el C_2H_2 .

TABLA 2.1.— Degeneraciones nucleares dependiendo de las simetrías del nivel $[v]\ell J$.

Simetría (g, u)	Paridad 1 (e, f)	Paridad 2 (J par, impar)	Simetría global	Degeneración		
				C_2H_2	$^{13}C_2H_2$	HCN
g	e	par	s	1	6	1
		impar	a	3	10	1
	f	par	a	3	10	1
		impar	s	1	6	1
u	e	par	a	3	10	—
		impar	s	1	6	—
	f	par	s	1	6	—
		impar	a	3	10	—

En la columna de la degeneración, a quiere decir antisimétrico y s simétrico. El valor de la degeneración depende de la simetría del isotópomo. La degeneración de C_2H_2 también se puede aplicar a las especies C_4H_2 y C_6H_2 . Hemos introducido el HCN para poder comparar aunque esta especie no presenta simetría $g - u$. Las degeneraciones de HCN son también las de $H^{13}CN$ y $H^{13}CCH$.

un estado vibracional σ^+) tiene degeneración de espín g_s mientras que si J es impar, la degeneración de espín es g_a . Por otro lado, si el nivel vibracional es *ungerade* (como ν_5 en el caso del acetileno), a los niveles rotacionales con J par les corresponde g_a y a los de J impar, g_s . A lo largo de esta Tesis usaremos el convenido por el que los subíndices a y s de las degeneraciones se refieren a la función de onda rotacional+vibracional, no a la nuclear. Esto implica que cuando la función de onda rovibracional es simétrica, la nuclear debe ser antisimétrica ($|\uparrow\downarrow\rangle$) y cuando la función de onda rovibracional es antisimétrica, es que la nuclear es simétrica ($|\uparrow\uparrow\rangle$).

2.1.5. Reglas de selección rovibracionales

En el caso de todas las moléculas simétricas con respecto al plano medio molecular (C_2H_2 , $^{13}C_2H_2$, C_4H_2 y C_6H_2) las transiciones rotacionales puras son transiciones prohibidas porque el momento dipolar permanente es nulo. No ocurre así con las especies o los isotópomos no simétricos, que sí tienen un pequeño momento dipolar permanente (por ejemplo, el momento dipolar del HCCD es de $\simeq 0.001$ D, siendo inducido por el deuterio). Pero, a pesar de esto, todas las moléculas que estamos estudiando tienen transiciones rovibracionales pues éstas no dependen del valor del momento dipolar sino del valor de su derivada con respecto a las coordenadas normales de los modos de vibración (por ejemplo, [Levine, 1975](#), pág. 257-258).

Se puede demostrar que las transiciones rovibracionales en un trompo simétrico se deben o bien a una variación en el momento dipolar paralela al eje de simetría, *transiciones paralelas* (\parallel), o bien perpendicular a éste, *transiciones perpendiculares* (\perp). Teniendo en cuenta la aproximación de oscilador anarmónico, se puede ver que las reglas de selección para las transiciones paralelas son distintas que para las perpendiculares. Las paralelas dan lugar a las ramas R y P mientras que las perpendiculares, a las ramas P, Q y R⁷. Las reglas de

⁷Una consecuencia de las reglas de selección es que tanto las ramas P como las R se dan entre niveles con la misma paridad e o f mientras que las ramas Q involucran niveles con paridades contrarias ($e - f$ o $f - e$).

selección para una transición rovibracional son:

$$\begin{array}{ll}
 \Delta v_i = \pm 1 & i = \text{modos de flexión} \\
 \Delta v_i = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots & i = \text{modos de tensión} \\
 \Delta \ell_i = 0, \pm 1 & \Delta \ell_i = 0 \text{ permitida sólo si } \ell_{i,\text{inf}} = 0; i = \text{modos de flexión} \\
 \sigma^+ \leftrightarrow \sigma^- & \text{prohibida} \\
 g \leftrightarrow u & \text{permitida para moléculas simétricas} \\
 g \leftrightarrow g \quad u \leftrightarrow u & \text{prohibida para moléculas simétricas} \\
 \Delta J = 0, \pm 1 & \Delta J = 0 \text{ prohibida si } J = 0 \leftrightarrow J = 0, \text{ cuando } \Delta \ell = 0 \text{ y } \ell_{\text{inf}} = 0, \\
 & \text{y para transiciones paralelas; permitida en cualquier otro caso} \\
 e \leftrightarrow e \quad f \leftrightarrow f & \text{permitida para las ramas R y P; rohibida para la rama Q} \\
 e \leftrightarrow f & \text{permitida para la rama Q; prohibida para las ramas R y P,}
 \end{array} \quad (2.12)$$

donde $\Delta X = X_{\text{sup}} - X_{\text{inf}}$.

Según las reglas anteriores, las transiciones paralelas siempre son permitidas independientemente de los estados vibracionales inicial y final aunque las más intensas son las que cumplen que $\Delta v = \pm 1$. Conforme aumenta el valor de $|\Delta v|$ disminuye la intensidad de la transición. En transiciones que incluyan niveles de combinación, las reglas de selección se aplican a cada modo vibracional por separado.

2.1.6. Intensidad de línea

La dependencia de la intensidad de línea con la temperatura producida por un medio en equilibrio termodinámico es (Jacquemart et al., 2001):

$$S(T) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{g_{\text{inf}}^s \nu_0}{Z(T)} \frac{1}{g_v} |R|^2 L(J, \ell) e^{-hcE_{\text{inf}}/k_B T} \left[1 - e^{-hc\nu_0/k_B T} \right], \quad (2.13)$$

donde el cuadrado del momento dipolar, $|R|^2$, está expresado en Debye², ν_0 es la frecuencia central de la línea en cm^{-1} , E_{inf} es la energía del nivel inferior en cm^{-1} , g_{inf}^s es la degeneración de espín del nivel inferior, $L(J, \ell)$ es la fuerza de línea (o factor de Höln-London) y $Z(T)$ es la función de partición molecular a la temperatura T . El factor g_v vale 2 cuando los niveles vibracionales superior e inferior involucrados en la transición rovibracional están desdoblados por la acción del momento angular vibracional, es decir, si $\ell_{\text{sup}}, \ell_{\text{inf}} \neq 0$. En cualquier otro caso, $g_v = 1$. Si $g_v = 2$ el valor utilizado de $|R|^2$ considera las dos subramas, e y f , a la vez. La fuerza de línea de una transición rovibracional, $L(J, \ell)$, para una molécula lineal viene dada por las siguientes expresiones (Rothman et al., 1992; Herzberg I, 1989)⁸:

$$L(J, \ell) = \begin{cases} \begin{array}{ll} (J+1+\ell)(J+1-\ell)/(J+1) & \text{rama R, } \Delta \ell = 0; \\ (2J+1)\ell^2/J(J+1) & \text{rama Q, } \Delta \ell = 0; \\ (J+\ell)(J-\ell)/J & \text{rama P, } \Delta \ell = 0; \end{array} \\ \begin{array}{ll} (J+2+\ell\Delta\ell)(J+1+\ell\Delta\ell)/2(J+1) & \text{rama R, } \Delta \ell = \pm 1; \\ (J+1+\ell\Delta\ell)(J-\ell\Delta\ell)(2J+1)/2J(J+1) & \text{rama Q, } \Delta \ell = \pm 1; \\ (J-1-\ell\Delta\ell)(J-\ell\Delta\ell)/2J & \text{rama P, } \Delta \ell = \pm 1. \end{array} \end{cases}, \quad (2.14)$$

donde tanto J como ℓ están referidos al nivel inferior, $\Delta \ell = \ell_{\text{sup}} - \ell_{\text{inf}}$, las transiciones paralelas son aquellas que tienen $\Delta \ell = 0$ y las perpendiculares la que cumplen que $\Delta \ell = \pm 1$.

⁸Las siguientes expresiones son las mismas que obtendríamos de estudiar el desdoblamiento sufrido por las líneas producido por la interacción entre el momento angular orbital electrónico con el momento angular total, también llamado *desdoblamiento* Λ .

2.2. Casos particulares

2.2.1. C_2H_2 , H^{13}CCH y $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$

Los tres isotopómeros más abundantes del acetileno son $^{12}\text{C}_2\text{H}_2$ (C_2H_2), $\text{H}^{13}\text{C}^{12}\text{CH}$ (H^{13}CCH) y $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$. El acetileno es una molécula lineal con 5 modos normales de vibración (ver Figura 2.1). Los modos de flexión ν_4 y ν_5 están doblemente degenerados en primera aproximación, con energías de 612.871 y 730.332 cm^{-1} respectivamente (Herman et al., 2003). El modo ν_4 es inactivo en el infrarrojo para el C_2H_2 y el $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$ aunque sí es activo para el H^{13}CCH . Los modos de tensión ν_1 , ν_2 y ν_3 tienen energías de 3372.849, 1974.316 y 3294.839 cm^{-1} respectivamente para C_2H_2 , y son ligeramente distintas para el resto de los isotopómeros (Herman et al., 2003).

El C_2H_2 y el H^{13}CCH son iguales excepto por sus carbonos. En el H^{13}CCH uno de los carbonos tiene un neutrón más que el otro lo que hace que su centro de masas esté desplazado hacia el ^{13}C y el momento de inercia sea algo distinto, modificando a su vez la constante rotacional. No presenta prácticamente ninguna diferencia electrónica ni vibracional con el C_2H_2 ⁹, pero la presencia del ^{13}C rompe una de las simetrías de la molécula. De este modo, es posible una diferenciación entre ella y su reflexión especular con respecto al plano medio molecular. Una de las consecuencias de esta ruptura de simetría es que la transición $\nu_4(\pi) \rightarrow \text{G.S.}(\sigma^+)$ es permitida para las transiciones dipolares eléctricas. Además, por esta falta de simetría, el H^{13}CCH tiene un momento dipolar permanente pequeño a lo largo del eje molecular. Es, por tanto, posible encontrar un espectro de rotación puro débil. Por otro lado, vemos que el $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$ también presenta diferencias similares a las del caso del H^{13}CCH con respecto al C_2H_2 , excepto en la simetría de reflexión: la molécula también es simétrica con respecto al plano medio molecular. Tanto el C_2H_2 como el $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$ tienen un momento dipolar permanente nulo debido a su simetría con respecto al plano medio molecular. Por lo tanto, no tienen transiciones rotacionales puras.

En cuanto a la degeneración procedente de la función de onda de espín nuclear, en el caso del H^{13}CCH es 1 porque la falta de simetría $g-u$. Las bandas moleculares no muestran ninguna alternancia en intensidades (Di Lonardo et al., 1993). Por otro lado, las moléculas C_2H_2 y $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$ son simétricas con respecto al plano medio molecular y su degeneración por espín es $g_a = 3$ y $g_s = 1$ para el C_2H_2 (o- C_2H_2 y p- C_2H_2 , respectivamente), y $g_a = 10$ y $g_s = 6$ para el $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$ (o- $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$ y p- $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$, ver Tabla 2.1). La diferencia entre las degeneraciones procede de que $I(^{12}\text{C}) = 0$ mientras que $I(^{13}\text{C}) = 1/2$.

Las derivadas del momento dipolar que utilizaremos para calcular el espectro del C_2H_2 y de las transiciones rovibracionales de la banda $\nu_5(\pi) \rightarrow \text{G.S.}(\sigma^+)$ del H^{13}CCH proceden de la Base de Datos HITRAN (Rothman et al., 2003), mientras que hemos considerado los momentos de las bandas calientes del H^{13}CCH iguales a los del C_2H_2 por falta de datos de laboratorio publicados al respecto (ver Tabla 2.2). No nos ha sido posible encontrar información sobre los momentos dipolares de las transiciones vibracionales del $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$. Por eso aceptamos los valores del C_2H_2 como una buena aproximación.

Hemos tomado los datos espectroscópicos del acetileno y sus isotopómeros principalmente de la Base de Datos HITRAN y completado esta información con datos publicados por Herman et al. (2003), Kabbadj et al. (1991) y Di Lonardo et al. (1993, 2002). Las frecuencias de estas líneas tienen precisiones mejores que 10^{-3} cm^{-1} ($\simeq 0.4 \text{ km s}^{-1}$).

2.2.2. C_4H_2

El C_4H_2 (diacetileno) es una molécula lineal formada por 6 átomos con 9 modos vibracionales: 5 de ellos son modos de tensión (ν_1 , ν_2 y ν_3 de tipo σ_g^+ , y ν_4 y ν_5 de tipo σ_u^+) y el resto son modos de flexión (ν_6 y ν_7 de tipo π_g , y ν_8 y ν_9 de tipo π_u). Sus energías son 3332.1548,

⁹La vibración nuclear queda afectada por el mismo motivo que la función de onda electrónica: el neutrón de diferencia en uno de los carbonos. Esa diferencia de masa produce una ligera variación en las frecuencias de vibración que además, tiene como consecuencia un pequeño cambio en la función de onda nuclear.

TABLA 2.2.— Momentos dipolares de las transiciones vibracionales del C₂H₂ y HCN

C ₂ H ₂			HCN		
Transición	g_v	$ R_0 ^2 (\times 10^{-2} \text{D}^2)$	Transición	g_v	$ R_0 ^2 (\times 10^{-2} \text{D}^2)$
$\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+)$	1	9.81 ± 0.11^a	$\nu_2(\pi) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma^+)$	1	3.8925 ± 0.0016^b
$\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+) \leftrightarrow \nu_4(\pi_g)$	1	4.904 ± 0.063^a	$2\nu_2(\sigma^+) \leftrightarrow \nu_2(\pi)$	1	3.39^c
$\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-) \leftrightarrow \nu_4(\pi_g)$	1	5.006 ± 0.062^a	$2\nu_2(\delta) \leftrightarrow \nu_2(\pi)$	2	7.14^c
$\nu_4 + \nu_5(\delta) \leftrightarrow \nu_4(\pi_g)$	2	9.599 ± 0.084^a			
$2\nu_5(\sigma_g^+) \leftrightarrow \nu_5(\pi_u)$	1	9.79 ± 0.19^a			
$2\nu_5(\delta) \leftrightarrow \nu_5(\pi_u)$	2	18.86 ± 0.14^a			

a) Jacquemart et al. (2001)

b) Malathy Devi et al. (2005)

c) El momento dipolar vibracional ha sido obtenido a partir de ajustes a los datos disponibles en la [Base de Datos HITRAN](#), compilación 2004. Malathy Devi et al. (2005) advierte que los valores de esta base de datos para la transición $\nu_2 \leftrightarrow \text{G.S.}$ del HCN son menores de lo que deberían ser. Por lo tanto, es posible que ocurra igual para otras transiciones. Por consiguiente, vamos a usar los mismos valores para $2\nu_2(\sigma^+) \leftrightarrow \nu_2(\pi)$ y $2\nu_2(\delta) \leftrightarrow \nu_2(\pi)$ que para $\nu_2(\pi) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma^+)$, tomando el momento dipolar para ésta última de Malathy Devi et al. (2005) como un aproximación.

Nota.— Ver las Secciones 2.1.6 y 2.1.5 para obtener información sobre las reglas de selección para las transiciones rovibracionales y la definición de g_v .

2188.9285, 871.9582, 3333.6646, 2022.2415, 625.4986, 482.7078, 627.8958 y 219.9778 cm⁻¹ respectivamente (Guelachvili et al., 1984). Al igual que en el caso del C₂H₂ y del ¹³C₂H₂, el C₄H₂ es simétrico con respecto al plano medio molecular y no presenta momento dipolar permanente. Es por ello por lo que no tiene espectro de rotación pura aunque sí muchas bandas activas en el infrarrojo. Tiene dos átomos de ¹H con espín $I(^1\text{H}) = 1/2$ y 4 átomos de ¹²C con espín $I(^{12}\text{C}) = 0$, por lo que el C₄H₂ está dividido en o-C₄H₂ y p-C₄H₂ con la misma estadística de espín que el C₂H₂. Desafortunadamente, esta especie molecular está bastante mal caracterizada y sólo se pueden encontrar algunas constantes espectroscópicas en la literatura. Hemos adoptado las constantes obtenidas por McNaughton & Bruget (1992); Guelachvili et al. (1984); Arie & Johns (1992) y las hemos utilizado para calcular el espectro de la banda $\nu_6 + \nu_8(\sigma_g^+)$ de esta molécula. Las energías de los niveles vibracionales hasta $\nu_1 + \nu_8(\pi_u)$ (situado a 3940.5 cm⁻¹) proceden de los trabajos de Guelachvili et al. (1984); McNaughton & Bruget (1992); Matsumura & Tanaka (1982); Matsumura et al. (1984). Hemos añadido a la estructura vibracional un gran número de estados vibracionales por debajo de los 4000 cm⁻¹ no caracterizados experimentalmente mediante el cálculo de sus energías a partir de las constantes espectroscópicas. El momento dipolar para cada transición rovibracional no se conoce actualmente, así que lo hemos derivado a partir de la opacidad de la banda completa obtenida por Khlifi et al. (1995) ($\simeq 171 \text{ cm}^{-1} \text{ atm}^{-1}$), dividiendo por la función de partición vibracional ($\simeq 3$) para corregir esa opacidad de la presencia de bandas calientes como $\nu_6 + \nu_8 + \nu_9(\pi_g) - \nu_9(\pi_u)$ en las medidas (McNaughton & Bruget, 1992). Khlifi et al. (1995) no hablan en ningún momento de la presencia de estas bandas calientes pero la temperatura durante el experimento es suficientemente alta ($\simeq 300 \text{ K}$) como para que contribuyan significativamente. En el proceso de obtención del momento dipolar, hemos considerado que los *coeficientes de Herman-Wallis*¹⁰ son nulos y hemos calculado la función de partición a 300 K con la ayuda del modelo de CSE desarro-

¹⁰ Los *coeficientes de Herman-Wallis* permiten expresar los momentos dipolares de las transiciones rovibracionales de las ramas R, P y Q de una banda dada mediante una dependencia del tipo $|R|^2 = |R_0|^2 F(m)$, siendo $|R_0|^2$ el momento dipolar de la transición vibracional. $F(m)$ depende de la rama de tal modo que $F^{\text{PR}}(m) = (1 + A_1^{\text{PR}}m + A_2^{\text{PR}}m^2)^2$ y $F^{\text{Q}}(m) = [1 + A_2^{\text{Q}}m(m+1)]^2$, con $m = J+1$ para la rama R, $m = -J$ para la rama P y $m = J$ para la rama Q (Jacquemart et al., 2001). Para el caso del C₂H₂ los coeficientes de Herman-Wallis son $\sim 10^{-4} - 10^{-3}$, dependiendo de la banda, pero no se conocen ni para el C₄H₂ ni para el C₆H₂.

llado durante esta Tesis (ver Sección 3.3.12 y Apéndice A.9). El método consiste en calcular numéricamente el momento dipolar vibracional utilizando para ello la expresión analítica de la suma de las opacidades de todas las líneas de la banda (según la Ec. 2.13) con las mismas condiciones físicas que las existentes durante el experimento (ver Apéndice A.9). Al tomar los coeficientes de Herman-Wallis nulos el momento dipolar no depende de la transición rovibracional, siendo igual para todas ellas, y pudiéndose sacar como factor común de la suma de opacidades. Este método ha sido testado con varias bandas del C_2H_2 (Jacquemart et al., 2001) produciendo momentos dipolares menores que los publicados en un 1.5 % en promedio. Utilizando este procedimiento, el momento dipolar de cada transición rovibracional del C_4H_2 es $\simeq 0.096$ D, adoptando como error el derivado para el caso del C_2H_2 .

2.2.3. C_6H_2

El C_6H_2 (triacetileno) tiene dos átomos más que el C_4H_2 , lo que le da 4 modos normales adicionales. Los modos del ν_1 al ν_4 (σ_g^+) y del ν_5 al ν_7 (σ_u^+) son modos de tensión, mientras que aquéllos del ν_8 al ν_{10} (π_g) y del ν_{11} al ν_{13} (π_u) son modos de flexión. Sus energías son 3313, 2201, 2019, 625, 3328.76, 2128.92, 1115, 622.38, 491, 258, 621.34, 443.5 y 105.04 cm^{-1} , respectivamente. La precisión de los experimentos no es todavía lo suficientemente grande como para dar las energías de todos los estados vibracionales con uno o dos decimales. Con el C_6H_2 ocurre lo mismo que con el C_4H_2 y el C_2H_2 : su simetría con respecto al plano medio molecular hace que el momento dipolar permanente sea nulo y que no tenga espectro rotacional puro. Como para el C_4H_2 , el C_6H_2 está compuesto por dos especies distintas, el o- C_6H_2 y el p- C_6H_2 , con la misma estadística de espín que el C_2H_2 . La falta de valores de las constantes espectroscópicas en la literatura es incluso mayor que para el C_4H_2 . Es por ello que, al igual que ocurre con las energías de los niveles vibracionales, las frecuencias de las líneas no son todo lo precisas que sería deseable. Las constantes que hemos utilizado han sido tomadas de los trabajos de Matsumura et al. (1993); McNaughton & Bruget (1991); Haas et al. (1994). Utilizándolas, hemos calculado las energías de una gran cantidad de niveles vibracionales entre el nivel fundamental y el nivel superior elegido de la banda $\nu_8 + \nu_{11}(\sigma_u^+)$. Para el cálculo de los momentos dipolares hemos utilizado el mismo procedimiento que para el C_4H_2 , tomando la opacidad de la banda completa obtenida por Shindo et al. (2003) ($\simeq 210$ cm^{-1} atm $^{-1}$) y corregida, como en el caso del C_4H_2 , de la contribución de la opacidad procedente de las bandas calientes (la función de partición vibracional calculada es $\simeq 10$; McNaughton & Bruget, 1991). El momento dipolar calculado para la banda $\nu_8 + \nu_{11}(\sigma_u^+) - G.S.(\sigma_g^+)$ es $\simeq 0.12$ D, con un error similar al propuesto para el C_2H_2 .

2.2.4. C_8H_2

C_8H_2 es una molécula compuesta por 10 átomos, lo que le proporciona 17 modos vibracionales. Los 9 primeros son modos de tensión mientras que los otros 8 son de flexión: $\nu_{10} - \nu_{13}$ (π_g) y $\nu_{14} - \nu_{17}$ (π_u) con energías (teóricas) de 600, 537, 447, 164, 600, 514, 289 y 62 cm^{-1} (Shindo et al., 2001). Ninguna de las constantes espectroscópicas han sido determinadas por medio de trabajos en laboratorio. Aún así, hemos calculado $\simeq 400$ niveles entre el estado fundamental y $\simeq 1300$ cm^{-1} . B_0 ha sido obtenido teóricamente por Shindo et al. (2001) a partir de los resultados (también teóricos) derivados por Toto et al. (1996), quienes proponen un valor de $\simeq 1.87 \times 10^{-2}$ cm^{-1} . De igual modo que en los casos del C_4H_2 y del C_6H_2 , hemos estimado los momentos dipolares de las transiciones rovibracionales de la banda $\nu_{10} + \nu_{14}(\sigma_g^+)$ adoptando la opacidad obtenida experimentalmente por Shindo et al. (2001, 256 cm^{-1} atm $^{-1}$), habiendo sido corregida de la contribución de las bandas calientes ($Z_{vib} \simeq 14$). El momento dipolar derivado es $\simeq 0.14$ D.

2.2.5. HCN y H^{13}CN

Los cianopoliíños son también moléculas lineales. En esta Tesis sólo estudiaremos el HCN y su isotópomo más abundante, el H^{13}CN aunque hablaremos únicamente del HCN sin pérdida de generalidad¹¹. En realidad, la única diferencia significativa existente entre los poliíños y los cianopoliíños es que estos últimos tienen un momento dipolar permanente no nulo a lo largo del eje molecular, lo que da lugar a un espectro de rotación pura relativamente intenso y a una rama Q en todas sus bandas rovibracionales.

Los 3 átomos que componen el cianuro de hidrógeno son distintos, siendo imposible la existencia de simetría con respecto al plano medio molecular (simetría $g-u$). El HCN tiene 4 modos normales de vibración siendo dos de ellos, $\nu_1(\sigma^+)$ y $\nu_3(\sigma^+)$, modos de tensión y $\nu_2(\pi)$ el único modo de flexión (doblemente degenerado, ver Figura 2.4), con energías 3311.480, 2096.846 y 713.461 cm^{-1} , respectivamente (Maki et al., 2000). En consecuencia, los niveles rovibracionales del HCN en ν_2 sí tienen paridad $e-f$ pues esta paridad está relacionada con el momento angular vibracional generado por el modo de flexión ν_2 . La resolución espectral de las observaciones que estudiaremos más adelante es lo suficientemente buena como para poder observar fácilmente los desdoblamientos de las líneas rovibracionales.

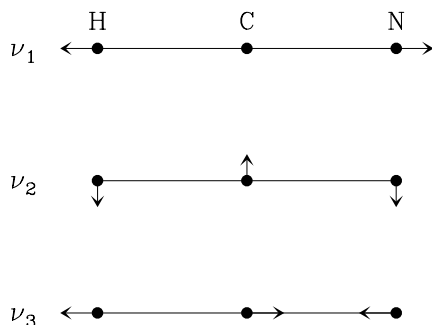


FIGURA 2.4.— Modos de vibración del HCN y sus isotópomos. Un sistema de 3 átomos tiene 4 modos normales de vibración, siendo el ν_1 y ν_3 modos de tensión y el ν_2 la combinación lineal del modo de flexión representado en la Figura y el que se mueve perpendicularmente al plano del papel, también de flexión y con la misma energía.

La estructura vibracional del HCN, bastante más sencilla que la del C_2H_2 (ver Figura 2.5), presenta un efecto interesante: una resonancia entre dos niveles vibracionales indicada mediante una doble flecha roja. Esta resonancia existe porque los niveles vibracionales $\nu_2 + \nu_3$ y $4\nu_2$ son muy próximos en energía, siendo posible que la misma molécula vibre con ambos modos al mismo tiempo. Como ya hemos visto anteriormente, este efecto da lugar a un máser bastante intenso en el estado vibracional $4\nu_2$.

En cuanto a la degeneración de los niveles rovibracionales de esta especie, basta decir que la estadística nuclear es trivial y no queda dividida en orto y para. Por ello, la degeneración de los estados vibracionales es también 1. Finalmente, teniendo en cuenta la degeneración rotacional, la degeneración total para un nivel rovibracional dado $g_{[v]\ell JP} = 2J + 1$.

Las frecuencias de las líneas rovibracionales, tomadas de la **Base de Datos HITRAN** y de Maki et al. (1996, 2000) y Malathy Devi et al. (2005), tienen precisiones de $\sim 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$. El valor del momento dipolar de la transición vibracional $\nu_2(\pi) \rightarrow \text{G.S.}(\sigma^+)$ es el publicado por Malathy Devi et al. (2005). Hemos utilizado este mismo valor para las bandas calientes con $\Delta\nu_2 = 1$ por no encontrar fiables los valores propuestos en la **Base de Datos HITRAN**.

¹¹En realidad, nos basta hablar del HCN para referirnos a todos los isotópomos del cianuro de hidrógeno, ya que las únicas diferencias existentes entre ellos son la variación de las distancias interatómicas, que modifica ligeramente el comportamiento electrostático del sistema, y la estructura hiperfina, generada por la interacción entre el momento de espín nuclear y el momento angular total molecular y que no trataremos en esta Tesis.

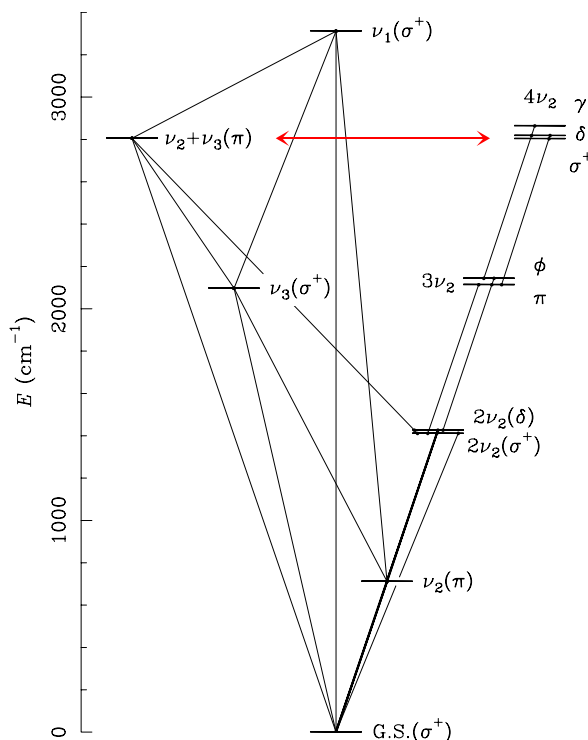


FIGURA 2.5.— Niveles vibracionales del cianuro de hidrógeno. En la Figura se muestran los niveles vibracionales del HCN (con $J = 0$) entre los 0 y los 3400 cm^{-1} . Se pueden ver las transiciones rovibracionales permitidas observadas en el rango $700 - 900 \text{ cm}^{-1}$ dibujadas como líneas negras gruesas (ver Sección 4). Con líneas negras delgadas están indicadas las transiciones más intensas entre los estados vibracionales dibujados. Hay que hacer notar que dependiendo del texto que se lea, uno puede encontrar intercambiados los nombres de los modos ν_1 y ν_3 . La doble flecha roja indica la existencia de una resonancia por la que varios niveles rotacionales de los estados vibracionales $\nu_2 + \nu_3(\pi)$ y $4\nu_2(\sigma^+)$ están prácticamente degenerados. Este efecto es bastante grande llegando a observarse un máser entre los niveles $J = 10$ y $J = 9$ del estado vibracional $4\nu_2(\sigma^+)$ (ver Sección 3.1.2 y [Schilke & Menten, 2003](#)).

2.2.6. SiS

A lo largo de este Capítulo hemos hablado del comportamiento cuántico de las moléculas lineales poliatómicas sin ocuparnos de las diatómicas, que son las más sencillas dentro de las lineales. Estas especies no poseen un momento angular vibracional puesto que el único modo normal de vibración que presentan es de tensión, por lo que tampoco presentan rama Q. En consecuencia, los niveles rovibracionales no están desdoblados en estados e y f . Igualmente, tampoco es necesario considerar la simetría $g - u$: en moléculas como el H_2 , que son simétricas con respecto al plano medio molecular, el modo de tensión es siempre *gerade* y no hace falta indicarlo.

El caso que nos ocupa, el SiS, corresponde a una molécula diatómica no simétrica con respecto al plano medio molecular y que por lo tanto tiene un momento dipolar permanente no nulo de $\simeq 1.73 \text{ D}$ ([Hoeft et al., 1969](#)). Esto implica que es posible observar el espectro rotacional puro. Las energías de los primeros estados vibracionales son 744.476 , 1483.790 y 2217.946 cm^{-1} ([Sanz et al., 2003](#); [Müller et al., 2007](#)). La notación utilizada para referirse a las transiciones rovibracionales de moléculas como ésta es tan sencilla como:

$$v_{\text{sup}} - v_{\text{inf}} B(J_{\text{inf}}). \quad (2.15)$$

Si las transiciones son de rotación pura, la expresión es aún más sencilla utilizándose únicamente la expresión:

$$v = v_{\text{sup}} (= v_{\text{inf}}) \quad J = J_{\text{sup}} - J_{\text{inf}}. \quad (2.16)$$

Para calcular las frecuencias del SiS, hemos utilizado los coeficientes de Dunham obtenidos por [Sanz et al. \(2003\)](#), para los cuales el error del centro de banda es $< 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ ($\simeq 0.04 \text{ km s}^{-1}$). La precisión relativa de las líneas de las bandas P y R es incluso mucho mejor.

De todos los isotopómeros del SiS, algunos como el $^{29}\text{Si}^{32}\text{S}$ o el $^{28}\text{Si}^{33}\text{S}$ poseen estructura hiperfina por el acoplamiento entre el espín nuclear del ^{29}Si o el ^{33}S y el momento angular rotacional. Sin embargo, el isotopómero principal ($^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$, que es el que nos interesa en esta Tesis) no sufre desdoblamiento por este efecto, por lo que no hablaremos de él.

Capítulo 3

Transferencia de radiación y modelo desarrollado

3.1. Teoría de la transferencia de la radiación

Todo el trabajo desarrollado para el estudio de los espectros observados, tanto de IRC+10126 como de CRL618, se basan en la realización de un modelo de transferencia de radiación en un sistema idealizado que se asemeje, por lo menos en sus rasgos más importantes, al estudiado. Ya que la transferencia radiativa es tan importante, le dedicaremos un Capítulo entero para poder exponer lo más claramente posible la teoría, los métodos utilizados comúnmente, el porqué de la elección del método adoptado y el propio desarrollo del modelo de CSE.

3.1.1. Transferencia de radiación

Siempre que tratemos de comprender o simular un sistema físico sometido a la acción de una radiación de cualquier tipo, debemos considerar cómo afecta la radiación a este sistema pero también cómo modifica el sistema afectado al propio campo de radiación en el que está sumergido. Para ello, consideremos un entorno del punto \mathbf{r} en un gas de densidad n_g y a una temperatura cinética T_K . Supongamos que este gas está compuesto por m especies moleculares con una abundancia con respecto a la de mayor proporción $\{x_i\}_{i=1}^m$ (con $x_1 = 1$), un coeficiente de Einstein¹ de absorción estimulada entre los niveles l y u igual a $\{B_{lu}^i\}_{i=1}^m$ ($E_l < E_u$ y con poblaciones n_l y n_u , respectivamente), otro de emisión espontánea $\{A_{ul}^i\}_{i=1}^m$ y una posible sección eficaz de dispersión $\{\sigma_{\nu \rightarrow \nu', i}^{s,g}(\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{v})\}_{i=1}^m$, que dispersa la radiación incidente con frecuencia ν en la dirección \mathbf{u} generando radiación con frecuencia ν' que sigue la dirección \mathbf{v} , como es el caso de la difusión Rayleigh. Para simular el efecto de los granos de polvo, consideremos que este medio también tiene una componente de centros emisores, absorbentes y dispersores, con una densidad n_d , estando todos ellos a una misma temperatura T_d (en equilibrio termodinámico) y compuestos por p materiales distintos, con una proporción con respecto al que presenta una mayor cantidad (en nuestro caso H_2) $\{y_j\}_{j=1}^p$ y con una sección eficaz de absorción $\{\sigma_{\nu,j}^{a,d}\}_{j=1}^p$ y de dispersión $\{\sigma_{\nu \rightarrow \nu', j}^{s,d}(\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{v})\}_{j=1}^p$. Por último, supongamos que sobre el punto considerado incide radiación en la dirección \mathbf{u} con una intensidad $I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u})$. En estas condiciones, tratemos de calcular el incremento de intensidad en la dirección incidente y a la misma frecuencia que aparece debido a la acción del medio material encerrado en el cilindro de la Figura 3.1.

La cantidad de energía con frecuencia entre $(\nu, \nu + d\nu)$ que atraviesa la superficie de área ds durante un intervalo de tiempo dt y que se propaga en una dirección contenida en el ángulo sólido $d\omega$ en torno a la dirección \mathbf{u} es $I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u})d\omega dl ds d\nu$, donde $dl = c dt$ es el

¹Los coeficientes de Einstein cumplen las relaciones $A_{ul} = 8\pi h\nu^3 B_{ul}/c^3$ y $g_u B_{ul} = g_l B_{lu}$.

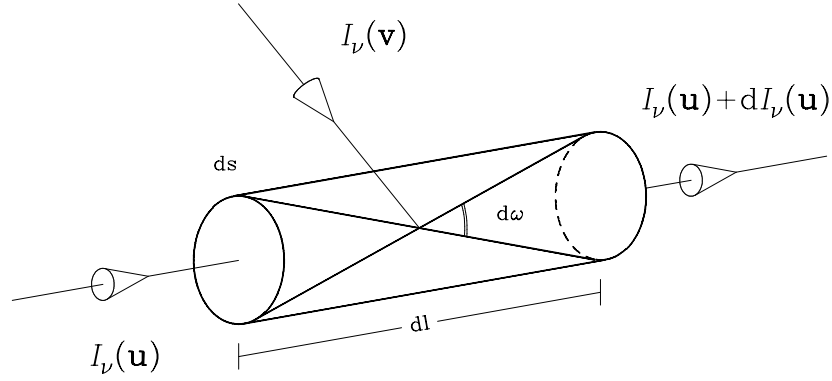


FIGURA 3.1.— Comportamiento de la luz en el entorno de un punto en el seno de un gas. La radiación que se propaga en la dirección \mathbf{u} e incide en un entorno infinitesimal del punto \mathbf{r} queda modificada por varias causas, a saber: la radiación incidente puede disminuir en intensidad por ser absorbida o dispersada, o puede aumentar por emisión molecular o dispersión de luz en la dirección de incidencia.

espacio recorrido por un fotón. Siguiendo el mismo razonamiento, la cantidad de energía emitida/absorbida en el cilindro que lleva la dirección \mathbf{u} es $dI_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u})d\omega d\mathbf{l}dsd\nu$. Así pues, la intensidad de la radiación que sale del cilindro con las frecuencias seleccionadas y en la dirección elegida, $I_\nu(\mathbf{r} + d\mathbf{r}, \mathbf{u})d\omega d\mathbf{s}d\nu$, es:

$$\begin{aligned}
 I_\nu(\mathbf{r} + d\mathbf{r}, \mathbf{u})d\omega d\mathbf{s}d\nu &= I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u})d\omega d\mathbf{s}d\nu dl + dI_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u})d\omega d\mathbf{s}d\nu dl \\
 &= I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u})d\omega d\mathbf{s}d\nu dl + \mathcal{E}_\nu^g(\mathbf{r}, \mathbf{u}) + \mathcal{S}_{\star \rightarrow \nu}^g(\mathbf{r}, \star \rightarrow \mathbf{u}) \\
 &\quad + \mathcal{E}_\nu^d(\mathbf{r}, \mathbf{u}) + \mathcal{S}_{\star \rightarrow \nu}^d(\mathbf{r}, \star \rightarrow \mathbf{u}) - \mathcal{A}_\nu^g(\mathbf{r}, \mathbf{u}) \\
 &\quad - \mathcal{S}_{\nu \rightarrow \star}^g(\mathbf{r}, \mathbf{u} \rightarrow \star) - \mathcal{A}_\nu^d(\mathbf{r}, \mathbf{u}) - \mathcal{S}_{\nu \rightarrow \star}^d(\mathbf{r}, \mathbf{u} \rightarrow \star),
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

donde $dl = |d\mathbf{r}|$, $\mathcal{E}_\nu^g(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ es la emisión de energía por parte del gas en la dirección dada por el vector unitario \mathbf{u} generada en un entorno del punto \mathbf{r} , $\mathcal{A}_\nu^g(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ es la absorción de energía que incide sobre ese mismo punto según la dirección \mathbf{u} , $\mathcal{S}_{\star \rightarrow \nu}^g(\mathbf{r}, \star \rightarrow \mathbf{u})$ es la cantidad de energía con una frecuencia aleatoria que se acerca a \mathbf{r} en cualquier dirección y es dispersada en la dirección \mathbf{u} con frecuencia ν y $\mathcal{S}_{\nu \rightarrow \star}^g(\mathbf{r}, \mathbf{u} \rightarrow \star)$ es la cantidad de energía con frecuencia ν que se mueve en la dirección \mathbf{u} que es dispersada en una dirección distinta de \mathbf{u} y con una frecuencia diferente a ν (igual para las magnitudes con subíndice d). Dado que la expresión completa de la ecuación de transferencia de radiación es bastante larga, en este Capítulo expondremos una reducida que, a la sazón, será la que utilizemos en el modelo. La expresión completa puede ser consultada en el Apéndice A.1. En el presente Capítulo, utilizaremos las siguientes hipótesis para desarrollar la teoría en la que se basa el modelo:

1. *Los perfiles de absorción y emisión estimulada y de emisión espontánea para las transiciones moleculares son iguales.* Esto supone una redistribución completa de los fotones emitidos en frecuencias y direcciones. Este fenómeno sólo se da de manera estricta cuando la excitación colisional domina frente a otras vías de excitación (van der Tak et al., 2007).
2. *Cualquier dispersión molecular distinta del proceso “absorción estimulada + emisión espontánea” no es importante y puede ser despreciada en todo el espectro.* La radiación incidente en un punto dado no es lo suficientemente intensa como para necesitar tener en cuenta la dispersión Rayleigh. Igualmente, no consideramos el efecto Compton pues la cantidad de radiación energética existente es pequeña y la mayor parte de la materia está en estado molecular y neutro.

3. La dispersión debida a los granos de polvo puede ser despreciada en el rango de longitudes de onda tratado en esta Tesis (8 – 14 μm). La justificación se verá en la Sección 3.3.1.
4. Las poblaciones moleculares son perfectamente conocidas. Las magnitudes relativas al gas dependen de las poblaciones de los niveles moleculares. En la práctica se debe resolver el problema de la transferencia radiativa junto con las ecuaciones de equilibrio estadístico. Comúnmente, se utiliza un proceso iterativo y autoconsistente para obtener las poblaciones y el campo de radiación en el estado estacionario. Sin embargo, formalmente podemos suponer que conocemos las poblaciones y tomarlas como independientes de la intensidad del campo de radiación y dependientes del punto \mathbf{r} . Igualmente, podemos hacer lo mismo con las poblaciones y dar expresiones (formales) para ellas dependientes del campo de radiación en el régimen estacionario. Este método nos permite obtener resultados cualitativos acerca del proceso de interacción radiación-materia.

A partir de ahora, y haciendo uso de las hipótesis anteriores, omitiremos el vector posición \mathbf{r} y el vector dirección \mathbf{u} en las expresiones para hacer la ecuación más manejable, ya que todas las magnitudes están evaluadas en ese punto y actúan en esa dirección:

$$dI_\nu d\omega ds d\nu = \mathcal{E}_\nu^g + \mathcal{E}_\nu^d - \mathcal{A}_\nu^g - \mathcal{A}_\nu^d,$$

es decir,

$$\begin{aligned} \frac{dI_\nu}{dl} = h\nu \sum_{i=1}^m \left[\frac{1}{4\pi} A_{ul}^i + \frac{1}{c} B_{ul}^i I_\nu \right] n_u^i \phi_{ul}^i (\nu - \nu_{ul}^i) + n_d \sum_{j=1}^p y_j \sigma_{\nu,j}^{a,d} S_\nu^d(T_d) \\ - h\nu \sum_{i=1}^m \frac{1}{c} B_{lu}^i I_\nu n_l^i \phi_{ul}^i (\nu - \nu_{ul}^i) - n_d I_\nu \sum_{j=1}^p y_j \sigma_{\nu,j}^{a,d}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Reescribiendo la ecuación de una forma más sencilla:

$$\frac{dI_\nu}{dl} = -[k_\nu^g + k_\nu^d] I_\nu + \varepsilon_\nu^g + \varepsilon_\nu^d \quad (3.3)$$

o bien

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = -I_\nu + \frac{k_\nu^g}{k_\nu^g + k_\nu^d} S_\nu^g + \frac{k_\nu^d}{k_\nu^g + k_\nu^d} S_\nu^d, \quad (3.4)$$

donde k_ν^g y S_ν^g y k_ν^d y S_ν^d son las opacidades y las funciones fuente del gas y del polvo, respectivamente, y τ_ν la profundidad óptica específica en la dirección \mathbf{u} . Los coeficientes de absorción vienen dados por:

$$k_\nu^g = \sum_{i=1}^m k_{\nu,i}^g = \frac{h\nu}{c} \sum_{i=1}^m n_l^i B_{lu}^i \left(1 - \frac{g_l^i n_u^i}{g_u^i n_l^i} \right) I_\nu n_l^i \phi_{ul}^i (\nu - \nu_{ul}^i), \quad (3.5)$$

$$k_\nu^d = \sum_{j=1}^p k_{\nu,j}^d = n_d \sum_{j=1}^p y_j \sigma_{\nu,j}^{a,d}, \quad (3.6)$$

$$\varepsilon_\nu^g = \frac{h\nu}{4\pi} \sum_{i=1}^m A_{ul}^i n_u^i \phi_{ul}^i (\nu - \nu_{ul}^i), \quad (3.7)$$

$$\varepsilon_\nu^d = n_d \sum_{j=1}^p y_j \sigma_{\nu,j}^{a,d} S_\nu^d(T_d), \quad (3.8)$$

$$S_\nu^g = \sum_{i=1}^m \frac{k_{\nu,i}^g}{k_\nu^g} \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{g_u^i n_l^i / g_l^i n_u^i - 1} \right). \quad (3.9)$$

Hemos supuesto la función fuente del polvo $S_\nu^d(T_d)$ como dependiente tan sólo de la dirección de propagación y de la temperatura de cada grano de polvo. La composición de los granos de polvo influye en cómo emite y absorbe cada grano por medio de la sección eficaz de absorción, distinta para cada especie y que puede variar de un punto a otro de la nube. Una buena aproximación a la función fuente del polvo consiste en tomar la función de Planck a una temperatura de cuerpo negro igual a T_d .

La ecuación de transporte radiativo tiene una solución formal sencilla. Omitiremos la resolución, que se puede encontrar en el Apéndice A.2, y expondremos únicamente el resultado. Así pues,

$$I_\nu = I_{\nu,0}e^{-\tau_\nu} + e^{-\tau_\nu} \int_0^{\tau_\nu} S_\nu(t)e^t dt, \quad (3.10)$$

donde consideramos

$$S_\nu(\tau_\nu) = \frac{k_\nu^g}{k_\nu^g + k_\nu^d} S_\nu^g + \frac{k_\nu^d}{k_\nu^g + k_\nu^d} S_\nu^d(T_d). \quad (3.11)$$

Nótese que $S_\nu(\tau_\nu)$ es una función fuente que engloba a todas las contribuciones del medio y que está compuesta por una suma pesada de todas las funciones fuente consideradas.

3.1.2. Introducción a la teoría del efecto máser

Utilizando la teoría formulada en el anterior punto, podemos llegar a encontrar la naturaleza del fenómeno máser. Antes considerábamos (sin mencionarlo pues es la situación común) que para un nivel rovibracional dado se cumplía que la cantidad de moléculas existentes en cada subnivel magnético decrecía estrictamente con J . Ésta es la situación asociada al equilibrio termodinámico y que se suele describir mediante el uso del factor de Boltzmann con una temperatura de excitación adecuada. Este hecho implica que la cantidad $n_l/g_l - n_u/g_u$ es positiva para cualquier par de niveles de la especie molecular dada. Pero ¿y si fuera posible que esa cantidad fuera negativa para algún par de niveles? Entonces, el comportamiento del sistema cambiaría profundamente puesto que la opacidad se haría negativa y con ella la profundidad óptica, τ_ν . Como la intensidad es una función del tipo $e^{-\tau_\nu}$, un cambio de signo en τ_ν introduciría una amplificación de tipo exponencial. Al fenómeno de cambio de signo de la cantidad $n_l/g_l - n_u/g_u$ asociada a una transición de una molécula en especial se le llama *inversión de población* y es la base del fenómeno máser. Llamaremos ζ al parámetro que controla la intensidad de la radiación máser y lo definiremos como $\zeta = n_u/g_u - n_l/g_l$ para una transición dada de una molécula dada.

Supongamos un gas monomolecular (para simplificar el desarrollo matemático) con una densidad de partículas n dependiente de la posición \mathbf{r} . Supongamos que la especie molecular es multinivel de tal modo que se produce una transición máser entre los niveles u y l , con $E_u > E_l$. Supongamos que existe un bombeo de moléculas $P_u(t)$ y $P_l(t)$ que representan cualquier aporte o extracción de población por parte del sistema a los niveles u y l por unidad de tiempo. Estas cantidades representan un número indeterminado de niveles rovibracionales en interacción con los considerados así como las transiciones colisionales. En estas condiciones, las ecuaciones que describen la evolución de las poblaciones n_u y n_l son:

$$\begin{aligned} \frac{dn_u}{dt} &= -\frac{4\pi}{c} B_{ul} I_{\nu_{ul}} n_u - A_{ul} n_u + \frac{4\pi}{c} B_{lu} I_{\nu_{ul}} n_l + P_u(t) \\ \frac{dn_l}{dt} &= \frac{4\pi}{c} B_{ul} I_{\nu_{ul}} n_u + A_{ul} n_u - \frac{4\pi}{c} B_{lu} I_{\nu_{ul}} n_l + P_l(t), \end{aligned} \quad (3.12)$$

donde $I_{\nu_{ul}} = I_\nu \phi_{ul}(\nu - \nu_{ul})$. En el estado estacionario tiene que ocurrir que $dn_u/dt = dn_l/dt = 0$, lo que implica que $d(n_u + n_l)/dt = 0$. Sea $n_{ul} = n_u + n_l$ la fracción de moléculas en la posición \mathbf{r} que están en los niveles u y l , de tal modo que en estado estacionario n_{ul} es constante en cada punto \mathbf{r} . Igualmente, se debe cumplir que $\lim_{t \rightarrow \infty} [P_u(t) + P_l(t)] = 0$,

o bien $\lim_{t \rightarrow \infty} P_u(t) = -\lim_{t \rightarrow \infty} P_l(t) = P_0$. Con todo esto, las poblaciones en el estado estacionario son:

$$n_u = \frac{P_0 + B_{lu}I_{\nu_{ul}}n_{ul}4\pi/c}{A_{ul} + (B_{lu} + B_{ul})I_{\nu_{ul}}4\pi/c} \quad (3.13)$$

$$n_l = \frac{A_{ul}n_{ul} - P_0 + B_{ul}I_{\nu_{ul}}n_{ul}4\pi/c}{A_{ul} + (B_{lu} + B_{ul})I_{\nu_{ul}}4\pi/c} \quad (3.14)$$

y la ecuación de transporte radiativo:

$$\frac{dI_\nu}{dl} = \frac{h\nu}{c} \zeta g_l B_{lu} \phi_{ul} (\nu - \nu_{ul}) I_\nu + \frac{h\nu}{4\pi} A_{ul} \phi_{ul} (\nu - \nu_{ul}) n_u = k_\nu I_\nu + \varepsilon_\nu, \quad (3.15)$$

donde $\zeta = n_u/g_u - n_l/g_l$ es el parámetro de inversión de población y vale en el estado estacionario

$$\zeta = \frac{(g_u^{-1} + g_l^{-1})P_0 - A_{ul}n_{ul}/g_l}{(B_{ul} + B_{lu})4\pi I_{\nu_{ul}}/c + A_{ul}}. \quad (3.16)$$

Se ve que para que exista una inversión de población debe ocurrir que $P_0 \geq A_{ul}n_{ul}/(1 + g_l/g_u)$. Como en el caso del transporte radiativo en equilibrio termodinámico, aquí también hemos asumido que en la expresión de las poblaciones la intensidad de la radiación es la que se alcanza en el estado estacionario y que en la ecuación del transporte radiativo, las poblaciones toman su valor estacionario pudiendo depender de la posición.

Definiendo τ_ν como

$$\tau_\nu = \int_0^l k_\nu dl = \frac{h\nu}{c} g_l B_{lu} \phi_{ul} (\nu - \nu_{ul}) \int_0^l \zeta dl \quad (3.17)$$

la solución de la ecuación de transferencia de radiación es similar a la Ec. 3.10:

$$I_\nu = I_{\nu,0} e^{\tau_\nu} + e^{\tau_\nu} \int_0^{\tau_\nu} S_\nu(t) e^{-t} dt, \quad (3.18)$$

siendo la función fuente para el gas también similar a la Ec. 3.9:

$$S_\nu = \frac{\varepsilon_\nu}{k_\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{1 - g_u n_l / g_l n_u}. \quad (3.19)$$

Nótese que en este caso la cantidad $0 < g_u n_l / g_l n_u < 1$, es decir, es necesario utilizar una temperatura de excitación negativa si se quiere expresar ese cociente mediante el factor de Boltzmann.

La Ec. 3.18 sugiere que la intensidad crece de manera exponencial. Pero, ¿es cierto esto para cualquier valor de la intensidad? La Ec. 3.16 depende de la intensidad de tal modo que $\lim_{I_{\nu_{ul}} \rightarrow \infty} \zeta = 0$, es decir, si la intensidad es muy grande en el estado estacionario la inversión de población tiende a anularse. No obstante, la intensidad por sí misma no puede llegar a destruir el efecto máser y, como veremos, sigue creciendo indefinidamente mientras el bombeo de los niveles u y l sea el adecuado. Cuando la intensidad del máser cumple que $I_{\nu_{ul}} \gg 2h\nu_{ul}^3/c^2$ (que es el equivalente físico a decir que $I_{\nu_{ul}} \rightarrow \infty$ para este caso), entonces $\zeta \simeq 0$ y se dice que el máser está *saturado*. En estas circunstancias la opacidad se hace despreciable y la profundidad óptica alcanza un valor límite (Ec. 3.17). Entonces,

$$\begin{aligned} \frac{dI_\nu}{dl} &= \frac{h\nu}{c} \zeta g_l B_{lu} \phi_{ul} (\nu - \nu_{ul}) I_\nu + \frac{h\nu}{4\pi} A_{ul} \phi_{ul} (\nu - \nu_{ul}) n_u \\ &\sim \frac{h\nu}{4\pi} A_{ul} \phi_{ul} (\nu - \nu_{ul}) n_u = \frac{h\nu}{4\pi} A_{ul} \phi_{ul} (\nu - \nu_{ul}) \frac{n_{ul}}{1 + g_l/g_u} \end{aligned} \quad (3.20)$$

lo que implica que:

$$I_\nu \sim \frac{h\nu}{4\pi} \frac{A_{ul}}{1 + g_l/g_u} \phi_{ul} (\nu - \nu_{ul}) \int n_{ul} dl. \quad (3.21)$$

Si bien $\int n_{ul} dl$ no es estrictamente proporcional a la densidad de columna para el caso de un medio inhomogéneo, sí podemos decir que $I_\nu \propto N_{\text{col}}$ cuando el medio es homogéneo y el máser queda saturado.

Por lo tanto, el comportamiento de I_ν cuando τ_ν es pequeña es exponencial mientras que cuando I_ν es suficientemente grande, ésta crece más o menos linealmente con la densidad de columna.

3.1.3. Anchura de una línea máser

El crecimiento exponencial de la intensidad de radiación máser da lugar a una anchura de línea peculiar con respecto a las líneas térmicas. Con el fin de exponer lo más claramente posible las diferencias entre la radiación máser y la térmica supondremos un medio homogéneo e isoterma, es decir, $S_\nu = \text{constante}$. Suponiendo que el máser amplifica inicialmente la emisión espontánea y los únicos fenómenos que modifican la anchura de la línea son la temperatura (ver Sección 3.3.11) y el efecto máser,

$$I_\nu = S_\nu (e^{\tau_\nu} - 1), \quad (3.22)$$

con $\tau_\nu = \tau_0 e^{-(\nu - \nu_{ul})^2 / \sigma^2}$ y donde el máximo de la intensidad, I^{max} , es $S_\nu (e^{\tau_0} - 1)$. La anchura de línea, $\Delta\nu = 2(\nu_1 - \nu_0)$, es tal que cumple que $I(\nu_1) = I^{\text{max}}/2$. Así pues:

$$\Delta\nu = 2\sigma \sqrt{\ln \left[\frac{\tau_0}{\ln(1 + e^{\tau_0}) - \ln 2} \right]}. \quad (3.23)$$

Cuando $\tau_0 \ll 1$:

$$\Delta\nu \sim 2\sigma \sqrt{\ln 2} \quad (3.24)$$

mientras que si $\tau_0 \gg 1$:

$$\Delta\nu \sim 2\sigma \sqrt{\ln \left[\frac{\tau_0}{\tau_0 - \ln 2} \right]}. \quad (3.25)$$

Como hemos visto anteriormente, a partir de un valor de la intensidad el máser queda saturado, el parámetro de inversión de población tiende a anularse y la profundidad óptica alcanza un valor límite. En consecuencia, la anchura de la línea también tiene un límite y nunca puede llegar a valer cero.

3.1.4. Mecanismos de bombeo máser

La inversión de población se puede conseguir de dos formas distintas:

1. mediante bombeo selectivo de ciertos niveles, ya sea colisional o radiativo, o
2. por diferencias cuánticas entre los niveles involucrados en la transición máser bajo ciertas condiciones de densidad y temperatura.

Una proceso cuántico relacionado con el primer método de inversión de población es, por ejemplo, un solapamiento con una línea intensa de otra especie molecular (ver, por ejemplo, [González-Alfonso & Cernicharo, 1997](#); [Fonfría Expósito et al., 2006](#)). Estos solapamientos hacen crecer la población del nivel superior o decrecer la del nivel inferior de la transición que da lugar al máser, alcanzándose la inversión de población. Las alteraciones sufridas por las poblaciones de los niveles que participan en la transición máser se propagan también a los niveles cercanos. El grado de alteración que sufran el resto de los niveles depende de la estructura cuántica molecular y cuan lejos queden el resto de los niveles del equilibrio. Si la inversión de población es lo suficientemente intensa, la aparición de un máser puede desencadenar la aparición de otros en diferentes niveles, siendo bastante difícil de predecir debido a los conocimientos generalmente deficientes del sistema y al comportamiento fuertemente no lineal del fenómeno máser.

El segundo método utiliza la existencia de transiciones moleculares que se producen entre niveles con propiedades cuánticas muy distintas, como puede ser una transición permitida entre dos niveles con el superior metaestable. Un bombeo significativo del nivel superior (usualmente por cascadas radiativas desde niveles de mayor energía) unido a la gran vida media del nivel metaestable hace que su población se incremente de manera muy importante con respecto al nivel inferior, que se desexcita de forma mucho más rápida. De esa forma aparece la inversión de población buscada.

3.1.4.1. Mecanismo clásico de bombeo máser

Este mecanismo fue propuesto por [Kwan & Scoville \(1974\)](#) para explicar las intensidades anómalas detectadas en las líneas del SiO $v = 1$ $J = 3 - 2$, $J = 2 - 1$ y $J = 1 - 0$ en Orión y algunas estrellas infrarrojas. Su método solamente requiere que las desexcitaciones vibracionales $v = 1 \rightarrow 0$ sean principalmente radiativas y que las transiciones $v = 0 \rightarrow 1$ sean ópticamente opacas. Si se cumplen estas dos condiciones, el nivel $v = 1$ $J = 0$ se puede desexcitar al estado vibracional fundamental únicamente mediante una transición de la rama P, ya que no existe rama Q en el espectro de una molécula diatómica. Por el contrario, el nivel $v = 1$ $J = 1$ puede desexcitarse de dos maneras distintas: mediante las ramas P y R. Por lo tanto, el ritmo de desexcitación del nivel $v = 1$ $J = 0$ es menor que el del $v = 1$ $J = 1$. Sin embargo, el ritmo de desexcitación por subnivel magnético es menor para el nivel $v = 1$ $J = 1$ que para el $v = 1$ $J = 0$. Entonces, si los niveles del estado $v = 1$ son poblados por colisiones o por otra ruta distinta, es posible que se llegue a la inversión de población. De este modo, se puede generar emisión máser en las transiciones $v = 1$ $J = 1 - 0$, $J = 2 - 1$, $J = 3 - 2$, etc., en este orden. La última transición que muestra el efecto máser depende de las rutas de bombeo.

Es importante hacer hincapié en que este mecanismo es únicamente aplicable a grupos de niveles rotacionales entre los que se producen transiciones tales que todas ellas dan lugar a emisión máser, sin que sea posible que alguna emita térmicamente. Esta propiedad procede del hecho de que las propiedades cuánticas de niveles rotacionales adyacentes son muy similares.

3.2. Métodos de transferencia radiativa

El problema del cálculo de la transferencia de radiación en sistemas complejos, compuestos por gas expandiéndose con un campo de velocidad dependiente del punto considerado y con temperaturas y densidades no homogéneos, es demasiado complicado como para darle soluciones analíticas. Es más, dependiendo del sistema, la cantidad de transiciones radiativas introducidas, el método utilizado y el grado de precisión requerido, puede utilizar una cantidad apreciable de tiempo de cálculo en los ordenadores más potentes existentes en la actualidad.

En las distintas épocas desde el inicio del tratamiento cuantitativo de estos sistemas, los métodos de cálculo utilizados han variado desde los métodos aproximativos como el tipo LVG (*Large Velocity Gradient*) o método de Sobolev, hasta los métodos que calculan los perfiles de línea esperados desde primeros principios, como son el método de Monte Carlo, ampliamente utilizado en las diferentes ramas de la física, o el método ALI (*Accelerated/Approximate Lambda Iteration*).

1. Método LVG o de Sobolev ([Sobolev, 1958, 1960](#); [Castor, 1970](#))

Este método está basado en la consideración de que el campo de velocidades del gas móvil tiene un gradiente lo suficientemente grande en la dirección de observación como para considerar que la anchura de las líneas en las regiones de emisión son despreciables. Esta aproximación permite proponer una expresión matemática sencilla para la forma de las líneas emitidas por el sistema. La ventaja de este método frente al resto es el poco tiempo de cálculo empleado para obtener los resultados: sólo hay

que resolver una integral relativamente sencilla para cada frecuencia además de las ecuaciones de equilibrio estadístico que no consumen un tiempo de cálculo excesivo. Con los equipos informáticos actuales es posible obtener un modelado completo de un gas multimolecular con una geometría compleja en pocos segundos. Por el contrario, muchas veces nos encontramos con sistemas con gradientes de velocidad no lo suficientemente grandes y los resultados derivados con este método no son fiables. Sin embargo, a pesar de esa falta de precisión en los valores del flujo emitido, la aplicación de este método genera líneas con perfiles similares a los observados que permiten una interpretación cualitativa del sistema estudiado. Es por todo ello por lo que este método se utiliza en general para el estudio de gases fríos, los cuales suelen cumplir fácilmente la condición impuesta debido a sus anchuras de línea pequeñas.

2. **Método de Monte Carlo** (Bernes, 1979; González-Alfonso & Cernicharo, 1993; Crosas & Menten, 1997; Schöier et al., 2006b)

El método de Monte Carlo es una aproximación estadística a problemas complejos mediante la simulación del comportamiento del sistema considerado en cada una de las situaciones posibles. Su aplicación a los sistemas astrofísicos permite hacer cálculos referentes a sistemas sin simetrías, con campos de velocidad y radiación anisótropos e inhomogéneos y con cualquier tipo de irregularidad en la densidad del medio. El método se basa en el estudio de varios fotones que podríamos llamar sintéticos, que representan a una cierta cantidad de fotones reales y que se desplazan en direcciones aleatorias y son generados de manera isótropa en posiciones al azar. Del mismo modo, a cada fotón sintético creado se le da una frecuencia también aleatoria a una distancia $\Delta\nu$ del centro de la línea que puede estar movida con respecto a la frecuencia de laboratorio por desplazamiento Doppler inducido por el campo de velocidades. A ese fotón sintético se le asigna un peso que decrece exponencialmente con su recorrido debido a la absorción del medio que atraviesa. Ese fotón deja de ser tenido en cuenta si escapa de la región considerada o si su peso es menor que un límite determinado. Para cada punto de su trayecto se calculan las poblaciones de las moléculas existentes mediante la resolución de las ecuaciones de equilibrio estadístico. El tiempo de cálculo empleado en la resolución de estas ecuaciones es pequeño en comparación con el tiempo total de cálculo, si el número de niveles involucrados en el problema es limitado, incrementándose aproximadamente de manera lineal con el número de transiciones tenidas en cuenta. En general, la mayor parte del tiempo de cálculo se emplea en el seguimiento de los fotones sintéticos. Debido a que es un método estadístico, el tiempo de convergencia es proporcional a $\sqrt{N_{\text{iter}}}$, donde N_{iter} es el número de iteraciones. Cuanto mayor sea la profundidad óptica del sistema, más lenta será la convergencia, siendo el número mínimo de iteraciones necesario para obtener una precisión aceptable del mismo orden que la profundidad óptica máxima. Se demuestra que el ruido estadístico en las soluciones es $\propto 1/\sqrt{N_{\text{fotones}}}$. Con estos métodos, se pueden obtener perfiles de línea con una precisión mejor que el 1 % obtenidas en un periodo de tiempo de cálculo razonable.

3. **Método Acelerado (Aproximado) de Iteración Lambda (ALI)** (Ribicky, 1972, 1984; Cannon, 1973; Ribicky & Hummer, 1991; Justtanont et al., 2005)

El método ALI es, al igual que el método de Monte Carlo, un método de tratamiento global de transferencia de radiación en sistemas complejos. El mayor problema del método de Monte Carlo es que no es aplicable a sistemas ópticamente opacos porque la convergencia se ralentiza al aumentar la profundidad óptica. Este problema se puede suprimir estudiando únicamente los fotones de las alas de la línea a estudiar, donde el gas es ópticamente transparente (método del *núcleo saturado*). Está basado en la utilización de una aproximación del operador $\Lambda_{\mu\nu}$, donde $I_{\mu\nu} = \Lambda_{\mu\nu} S_{\mu\nu}$, siendo $I_{\mu\nu}$ la intensidad media específica en la dirección μ y $S_{\mu\nu}$ la función fuente específica en el punto r según también la dirección μ . El problema central de este método

es la determinación de $\Lambda_{\mu\nu}^*$, una aproximación adecuada al operador $\Lambda_{\mu\nu}$, mientras que el principal beneficio es que las ecuaciones se mantienen lineales. Dependiendo de la aproximación (diagonal, tridiagonal, pentadiagonal, triangular superior, etc.) y los métodos puramente numéricos aplicados, la velocidad de convergencia es más o menos rápida.

3.3. Desarrollo del modelo de CSE

Como veremos en los Capítulos 4 y 6, una gran parte del objetivo de la presente Tesis es el estudio de dos espectros en el rango del infrarrojo medio de alta resolución espectral. Para ello, es necesario desarrollar un modelo de transferencia de radiación adecuado que pueda tratar tanto la contribución del polvo como la del gas. Desafortunadamente, ninguno de los métodos de simulación de envolturas circunestelares enumerados anteriormente son adecuados para el estudio que pretendemos hacer. La falta de precisión en la determinación de la forma de las líneas inherente al método LVG introduciría un error importante en los parámetros físicos de la envoltura determinados. Por otro lado, el gran número de niveles rovibracionales necesarios para la correcta determinación de las poblaciones y las abundancias moleculares, además de la gran profundidad óptica existente en IRC+10216, el desconocimiento de los coeficientes colisionales de una gran mayoría de las especies moleculares y la posible existencia de solapamientos de líneas, hacen inviable por una razón u otra el uso de los métodos no locales (Monte Carlo y ALI).

Es por ello por lo que necesitamos desarrollar un método que pueda tratar los problemas que los anteriores no pueden. En esta Sección expondremos las consideraciones y expresiones matemáticas necesarias para el desarrollo de modelo de envoltura circunestelar que pueda calcular el espectro infrarrojo generado por moléculas pesadas, es decir, con una gran cantidad de niveles vibracionales poblados.

Inicialmente propondremos varias hipótesis que el modelo debe cumplir para ser realista justificándolas ya sea teórica u observacionalmente, y que se refieren a los datos y comportamientos incluidos en la Sección 1.2. Seguidamente, mostraremos los algoritmos y fórmulas matemáticas implementadas explicando su procedencia y justificando su elección.

3.3.1. Hipótesis planteadas y consideraciones iniciales

El modelo desarrollado considera como válidas ciertas hipótesis acerca de la geometría del sistema y del comportamiento del gas y del polvo en la envoltura. Así pues, aceptaremos que el sistema a modelar verifica las siguientes hipótesis:

1. *El sistema tiene simetría esférica.* Observacionalmente se sabe que este sistema no es esféricamente simétrico pero las desviaciones que presenta la distribución de especies moleculares frente a esta geometría son bastante pequeñas. Es posible suponerlas como despreciables si tenemos en cuenta el grado de incertidumbre que va a tener el modelo, ya que conocemos pocos datos con precisión suficiente. Por ello, el esfuerzo que supondría hacer un modelo geoméricamente más cercano a la realidad no se vería compensado con los resultados obtenidos.
2. *El sistema es estacionario.* Podremos considerar que el sistema no evoluciona en el tiempo o que cualquier evolución es lo suficientemente lenta como para no tener que considerarla. En el caso de que hayan existido distintas etapas evolutivas que queden reflejadas en la envoltura, éstas no serán consideradas excepto en el caso de tener consecuencias importantes para la naturaleza y configuración de la envoltura. Tomaremos el flujo de materia eyectada como constante a lo largo de la historia de la estrella en esta fase, salvo que los perfiles de línea demuestren lo contrario.

3. *El sistema está aislado.* Consideraremos que el sistema está aislado del resto del universo radiativamente. La CSE está sometida a la acción de un campo de radiación UV no despreciable en las zonas exteriores pero la componente de polvo de la envoltura exterior atenúa la radiación protegiendo las regiones internas.
4. *La abundancia de las especies moleculares varía de forma sencilla en toda la región de la envoltura estudiada.* Debido a la falta de resultados experimentales determinantes con respecto al comportamiento con la distancia a la estrella de las abundancias moleculares, se puede considerar que su comportamiento espacial sigue una ley sencilla (p.e., una función escalón o incluso una función constante) que represente lo mejor posible las distintas regiones de la envoltura conforme a las observaciones.
5. *El sistema está fuera del equilibrio termodinámico.* En general, es posible considerar que las poblaciones de los niveles rotacionales con J pequeño en un nivel vibracional no muy energético siguen el equilibrio termodinámico local o ETL, pero no así los niveles con J grande. La densidad y la temperatura reinantes en la envoltura no son lo suficientemente grandes como para garantizar ETL para todos los niveles rotacionales. Por otro lado, es muy probable estas mismas condiciones físicas no permitan ni siquiera que los niveles vibracionales poco energéticos presenten este comportamiento, quedando fuera del equilibrio.
6. *Los perfiles de línea son gaussianos.* En este tipo de ambiente astrofísico la presión gaseosa no es importante, siendo posible despreciar este efecto en buena aproximación. Por el contrario, la temperatura cinética, T_K , es lo suficientemente grande como para producir un ensanchamiento térmico. En consecuencia, es posible adoptar gaussianas para los perfiles de línea. En el caso de existir fenómenos de microturbulencia, el perfil de las líneas se mantendría gaussiano con una anchura $\sigma = \sqrt{\sigma_{\text{térmica}}^2 + \sigma_{\text{microturbulencia}}^2}$. Además, también consideraremos que el perfil de absorción y el de emisión son iguales.
7. *Las temperaturas relativas al gas y la del polvo siguen leyes del tipo $r^{-\alpha}$.* Del estudio de una expansión adiabática y del enfriamiento de la envoltura por medio del CO, se deduce que la ley de temperaturas debe ser de ese tipo aunque el exponente no sea constante en toda la envoltura. Igualmente, este tipo de temperatura se ha utilizado con éxito para modelar el polvo en estudios anteriores. A pesar de que los resultados de trabajos anteriores no permiten asegurar inequívocamente que las temperaturas sigan esa ley, podemos tomarla como una aproximación aceptable para todas las temperaturas que utilizadas en el modelo.
8. *Los granos de polvo son esféricos y con radio constante en función de la distancia a la estrella.* Los modelos desarrollados hasta el momento muestran que para observaciones a longitudes de onda $> 5 - 10 \mu\text{m}$ el adoptar una población de granos de polvo esféricos con radios $< 0.1 \mu\text{m}$ e independientes de la distancia a la estrella es una buena aproximación.
9. *Los granos de polvo radian como cuerpos grises a una temperatura determinada.* Los granos absorben energía que les llega de la estrella y la reemiten en forma de radiación. Las colisiones que sufren con las moléculas del gas y entre ellos mismos calientan aún más los granos contribuyendo a la emisión radiativa. El comportamiento estacionario del sistema exige que los granos estén en equilibrio radiativo con su medioambiente manteniéndose constante su temperatura (en escalas de tiempo mucho menores que las relativas a la propia evolución de la CSE). Los procesos de absorción y emisión radiativa dependen de los materiales que conformen el grano, por lo que ni absorberán toda la energía en forma de radiación que les llegue ni la perderán por procesos totalmente radiativos. Es por ello que los tomaremos como cuerpos grises.

3.3.2. Geometría

Supongamos un sistema de simetría esférica formado por un objeto estelar central y una envoltura circunestelar compuesta de gas y polvo eyectados hacia el medio interestelar. Dividamos la envoltura en n capas concéntricas donde las magnitudes físicas y químicas del gas y del polvo se mantienen constantes. Al añadir la dirección de observación el nuevo sistema adquiere simetría cilíndrica en torno a ella. Introduciendo cilindros cuyo eje coincida con la dirección de observación y con un radio igual al de las esferas que delimitan las capas concéntricas, la envoltura queda dividida en regiones con propiedades físicas y químicas constantes. Observacionalmente, sólo se observa la proyección del sistema en la esfera celeste (2 dimensiones), siendo éste también cilíndricamente simétrico. Sin embargo, el estudio de la transferencia de radiación hace necesario la utilización de un eje de coordenadas paralelo a la dirección de observación. Por lo tanto, para estudiar el sistema nos basta con 2 coordenadas, a saber: la distancia angular al centro de la estrella y la distancia de un punto de la envoltura al plano tangente a la esfera celeste que pasa por el centro de la proyección de la fuente sobre ésta. Consideraremos coordenadas cartesianas con origen en el centro de la proyección de la envoltura en la esfera celeste y con los ejes contenidos en el plano tangente a la esfera en ese punto. Elijamos el centro de la estrella como el origen de coordenadas, tomemos el eje y como eje coincidente con la dirección de observación de modo que el valor de la coordenada y crezca en el sentido contrario a nosotros, y el eje x como el perpendicular al eje y . Por simetría, no es necesario considerar el eje z (ver Figura 3.2).

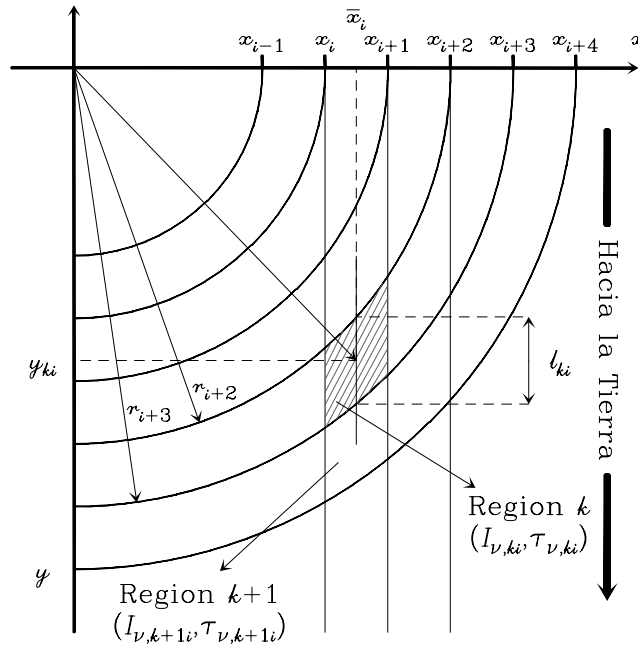


FIGURA 3.2.— Discretización de la envoltura en el plano xy . La región rayada viene caracterizada por las coordenadas de su centro y una longitud característica. El subíndice k varía para cada una de las regiones con la misma coordenada \bar{x} de sus centros. La región k -ésima está delimitada por la circunferencia $i+2$, la circunferencia $i+3$ y las líneas con coordenadas x_i e x_{i+1} .

Las regiones definidas anteriormente están caracterizadas por su grosor en la dirección x y su longitud en la y . Supongamos la región k -ésima. Como longitud característica se puede tomar la señalada en la Figura 3.2 que vale lo siguiente:

$$l_{k,i} = \sqrt{r_{k+1}^2 - \left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)^2} - \sqrt{r_k^2 - \left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)^2}. \quad (3.26)$$

Las coordenadas del centro de la región k son:

$$x = \frac{x_i + x_{i+1}}{2} \quad (3.27)$$

y

$$y_{k,i} = \frac{1}{2} s_k \left(\sqrt{r_{k+1}^2 - \left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2} \right)^2} + \sqrt{r_k^2 - \left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2} \right)^2} \right), \quad (3.28)$$

donde el parámetro s_k vale -1 si la región k está entre la estrella y nosotros y 1 si está más allá de la estrella. Estas expresiones se pueden usar para todas las regiones, excepto para aquellas zonas acotadas por una recta lateral, un arco y el eje x . Para ellas, la longitud es:

$$l_{k,i} = \sqrt{r_{k+1}^2 - \left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2} \right)^2} \quad (3.29)$$

y la coordenada y :

$$y_{k,i} = \frac{1}{2} s_k \sqrt{r_{k+1}^2 - \left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2} \right)^2}. \quad (3.30)$$

Este proceso de discretización de la CSE es importante puesto que los gradientes de la densidad y las temperaturas existentes cerca de la estrella son muy grandes. Es por ello que es una buena idea el utilizar una anchura de capa que dependa de la longitud, siendo más pequeña cuanto más cerca estamos de la estrella. De este modo la estructura física de la CSE queda bien muestreada. Dentro de todas las posibilidades hemos elegido dar un paso logarítmico de tal modo que la anchura logarítmica, δ , entre las fronteras (esféricas) de la capa i -ésima sea $\delta = (\log r_{i+1} - \log r_i) = \log R_{\text{ext}}/n$, donde n es el número total de capas en el que queremos dividir la envoltura. Esto supone, en escala lineal, que la relación existente entre las fronteras de la capa i es $r_{i+1} = r_i 10^\delta$.

3.3.3. Velocidades de expansión del gas y del polvo

Como vimos en la Sección 1.2.2, las líneas moleculares en el rango del infrarrojo observadas por [Keady et al. \(1988\)](#) y [Keady & Ridgway \(1993\)](#) sugieren que el campo de velocidades de expansión divide la envoltura en tres regiones distintas, que llamaremos Región I, II y III de aquí en adelante, y donde tomaremos la velocidad de expansión como constante. Estas tres regiones están delimitadas por la fotosfera estelar y las dos zonas de aceleración situadas a distancias R_{d1} y R_{d2} (ver Figura 1.9). En el estudio realizado sobre IRC+10216 que expondremos más adelante, adoptaremos este perfil y trataremos de determinar los parámetros que mejores resultados den.

El caso del campo de velocidades del polvo es más complicado de estimar, no habiendo datos observacionales al respecto. Utilizando expresiones sencillas, se puede dar una expresión matemática para la velocidad de expansión del polvo, v_d :

$$v_d = v + \sqrt{\langle Q \rangle \frac{L_* v}{\dot{M} c}}, \quad (3.31)$$

donde L_* es la luminosidad bolométrica de la estrella, v es la velocidad del gas, \dot{M} es el flujo de masa en forma gaseosa y $\langle Q \rangle^2$ es un parámetro que indica la fracción de energía

² $\langle Q \rangle$ está definido como $\langle Q \rangle = L_*^{-1} \int_0^\infty Q_\nu L_\nu d\nu$, donde L_ν es la luminosidad específica de la estrella, L_* la bolométrica y Q_ν indica cuan eficiente es un grano genérico al transformar la energía y el momento del fotón incidente con frecuencia ν en movimiento propio. El valor de Q_ν debe estar entre 1 y 2 ya que si el fotón es absorbido todo su momento lineal pasa a ser del grano y si es reflejado, el incremento de momento que adquiere el grano es de 2 veces el momento lineal del fotón.

luminosa que llega a los granos y que se transforma en energía cinética de estos. Desafortunadamente, apenas hay datos fiables relativos a $\langle Q \rangle$. Por otro lado, las velocidades de expansión del gas son $\sim 10 \text{ km s}^{-1}$ lo que implica que la velocidad de expansión de los granos de polvo debería ser $\sim 10 - 50 \text{ km s}^{-1}$. El desplazamiento Doppler que producirían estas velocidades en las bandas observadas en el continuo generado por el polvo es tan pequeño con respecto a la anchura de las bandas que se puede considerar que el polvo está en reposo. Entonces consideraremos que el polvo no se mueve.

3.3.4. Temperatura del gas

Una de las razones de no utilizar los métodos expuestos en la Sección 3.2 es el evitar el cálculo numérico de las poblaciones mediante la resolución de las ecuaciones de equilibrio estadístico. Una estimación razonablemente buena de las poblaciones de los niveles rovi-bracionales puede hacerse a partir de la determinación de las temperaturas de excitación, aprovechando el gran número de líneas rovi-bracionales observadas que se producen entre niveles por debajo de los 2500 cm^{-1} . Este método de procesamiento de los datos observacionales tiene en cuenta todos los fenómenos físicos que influyen en las poblaciones moleculares en el entorno de cada punto de la envoltura, como por ejemplo, los procesos colisionales. Por ello, adoptaremos una ley para las temperaturas del tipo $r^{-\alpha}$ y hallaremos los valores de los exponentes y las constantes multiplicativas. De este modo, obtendremos una estimación de las poblaciones de cada uno de los niveles.

3.3.4.1. Temperaturas de rotación y vibración

En la envoltura interna de IRC+10216 la densidad es grande. Es por ello por lo que podemos suponer ETL rotacional en esa región. Sin embargo, conforme nos alejamos de la estrella, la densidad decrece proporcionalmente a r^{-2} y la condición de ETL se convierte en poco realista para los niveles de mayor energía. El considerar ETL en toda la envoltura equivale a decir que en todas las regiones con magnitudes físicas constantes las poblaciones de los niveles rotacionales moleculares siguen la ley de Boltzmann y la temperatura de excitación no depende del nivel considerado. Es decir, las transiciones colisionales son mucho más importantes que las radiativas y el gas está termalizado rotacionalmente.

El ritmo de excitación colisional depende de la densidad del medio pero decrecen conforme aumenta la separación energética de los niveles entre los que producen la transición. Cuanto más baja sea la densidad, menor será el número de niveles que sigan la ley de Boltzmann, desviándose sobre todo en los niveles superiores. La razón es que, la cantidad de transiciones colisionales que pueblan los niveles se hace comparable al número de transiciones radiativas que los despueblan.

La separación energética entre niveles vibracionales adyacentes es, en general, mucho mayor que en el caso rotacional. Es por ello por lo que es muy probable que la molécula esté fuera de ETL vibracionalmente ya que la densidad crítica para las transiciones vibracionales es significativamente mayor que para la estructura rotacional.

Una manera de modificar sensiblemente la estadística de Boltzmann requiere la introducción de las *temperaturas de rotación y vibración*.

- *Temperatura de vibración*. Es la temperatura de excitación para cada nivel de la estructura vibracional. Al contrario que en el caso de la estructura rotacional, la vibracional suele ser bastante inhomogénea para moléculas poliatómicas con más de dos átomos de masa intermedia. El único modo vibracional existente en moléculas diatómicas permite que los niveles vibracionales presenten separaciones energéticas regulares, lo que sugiere la posibilidad de definir una temperatura vibracional que apenas dependa del nivel considerado. En el caso de las moléculas poliatómicas con muchos átomos, el número de modos vibracionales es muy grande ($3N - 6$, en general, siendo N el número de átomos) lo que implica que las diferencias energéticas entre dos

adyacentes son pequeñas. Este hecho sugiere que en medios con una densidad superior a la densidad crítica (vibracional) el sistema vibracional está cerca del ETL salvo por los efectos de las reglas de selección, tanto radiativas como colisionales. Sin embargo, las moléculas poliatómicas con pocos átomos (como es el caso del C_2H_2 y el HCN) tienen un número de modos vibracionales moderado que genera una cantidad igualmente moderada de niveles vibracionales pero con distancias energéticas entre niveles adyacentes muy dispares. Por ejemplo, en el C_2H_2 , la diferencia energética entre el nivel ν_4 y el fundamental es de 613 cm^{-1} mientras que la diferencia entre el ν_5 y el ν_4 es de unos 117 cm^{-1} . Así pues, las temperaturas vibracionales que representan adecuadamente estos sistemas pueden ser muy irregulares a no ser que la densidad del gas sea grande. Esta es la razón de que elijamos la temperatura vibracional como dependiente de los niveles vibracionales.

- *Temperatura de rotación.* Es la temperatura de excitación para cada nivel de la estructura rotacional. Esta temperatura depende del nivel vibracional por las modificaciones que sufre la constante de rotación al aumentar la vibración (recordemos que $B_{[v]} = B_e - \sum_{i=1}^n \alpha_{v_i} (v_i + d_i/2) = B_{[0]} - \sum_{i=1}^n \alpha_{v_i} v_i$, para una molécula con n modos de vibración, $[v] = (v_1, \dots, v_n)$ y donde d_i es la degeneración de cada modo). En el caso de considerar que esta temperatura no depende del nivel vibracional, la función de partición queda fraccionada en una rotacional y otra vibracional. Por supuesto, esta aproximación empeora conforme aumenta la energía del nivel vibracional considerado puesto que la fuerza centrífuga se incrementa al aumentar la amplitud de vibración, aumenta el momento de inercia y, en consecuencia, se reduce la constante de rotación ($B \propto I^{-1}$). Por otro lado, para especies moleculares en ETL la temperatura rotacional es constante para cualquier nivel. No obstante, esto no tiene por qué ocurrir en moléculas que no están en ETL y la temperatura rotacional depende del nivel rotacional considerado. En este tipo de estudios fuera de ETL, el concepto de temperatura comienza a perder significado convirtiéndose en una medida característica de la energía involucrada en los procesos de excitación que pueblan niveles rotacionales adyacentes. Esta temperatura nos permite utilizar el factor de Boltzmann para estimar la relación entre poblaciones, dándonos información sobre las desviaciones del sistema con respecto a lo esperado en ETL. En consecuencia, una elección razonable de las dependencias de la temperatura rotacional, habida cuenta la gran calidad de los datos a estudiar, es el considerar que depende tanto del nivel vibracional como del rotacional considerados.

3.3.4.2. Perfiles de temperatura

Como asumimos al comienzo de esta Sección, los perfiles de temperatura (ya sean cinética, vibracional, rotacional o del polvo) que se utilicen en el modelo van a seguir la ley $r^{-\alpha}$. Tanto la expresión de la temperatura generada por la expansión del gas, como la procedente del enfriamiento radiativo a través del CO, siguen la ley $r^{-\alpha}$. Por ello, los perfiles de temperatura (ya sea cinética, vibracional, rotacional o del polvo) que se utilicen en el modelo seguirán igualmente esta ley.

Al considerar la envoltura dividida en tres regiones distintas con propiedades que pueden ser diferentes, también pueden ser diferentes los perfiles de temperatura. Estas diferencias se traducen en exponentes distintos para cada región de la CSE. Por ello, los permitimos variar aunque imponiendo que los perfiles sean continuos a lo largo de toda la envoltura. El modo de modificar los exponentes es variando las temperaturas en las zonas de aceleración, esto es, en $r = R_{d1}$ y R_{d2} , y en la fotosfera estelar. El exponente de la ley de temperaturas (para el gas) en la Región III lo fijaremos a 1.0, ya que existen evidencias experimentales al respecto (Doty & Leung, 1997, ver Sección 1.2).

La forma de modificar la temperatura rotacional elegida se hace con respecto a la tem-

peratura cinética, es decir, dada una T_K suponemos que:

$$T_{\text{rot},[v]J}^i = T_K^i - C_{r1,[v]}^i \left(J - J_{0,[v]}^i \right) - C_{r2,[v]}^i \left(J - J_{0,[v]}^i \right)^2, \quad (3.32)$$

donde J es el número cuántico rotacional para cada nivel vibracional, i indica si la temperatura está medida en $r = 1$ R_{*}, R_{d1} o R_{d2}, y $C_{r1,[v]}^i$, $C_{r2,[v]}^i$ y $J_{0,[v]}^i$ son tres parámetros que controlan la desviación de $T_{\text{rot},[v]}^i$ con respecto a ETL en la posición de la envoltura i , siendo $T_{\text{rot},[v]J}^i$ la temperatura rotacional en la posición i asociada al nivel rotacional J dentro del vibracional $[v]$. Este método de desviación de la temperatura rotacional con respecto a la cinética permite introducir dependencias suaves de T_{rot} con J . Sin embargo, también es conveniente el poder especificar directamente el valor de T_{rot} para un nivel rotacional dado, esto es, de dar *temperaturas rotacionales anómalas o ad hoc*. Como veremos más adelante, será necesario en el estudio de IRC+10216.

Como vimos antes, la estructura vibracional de las especies moleculares a modelar puede ser tan irregular que una expresión similar a Ec. 3.32 no es útil. Por ello, el modo de modificar las T_{vib} en $r = 1$ R_{*}, R_{d1} y R_{d2} adoptado es dando directamente los valores para cada nivel vibracional.

Las definiciones de temperatura rotacional y vibracional vienen dadas por las expresiones:

$$\frac{P_{[v]J+1}^i}{P_{[v]J}^i} = \frac{g_{[v]J+1}}{g_{[v]J}} e^{-h(E_{[v]J+1} - E_{[v]J})/k_B T_{\text{rot},[v]J}^i} \quad (3.33)$$

y

$$\frac{P_{[v]+1}^i}{P_{[v]}^i} = e^{-h(E_{[v]+1} - E_{[v]})/k_B T_{\text{vib},[v]}^i}, \quad (3.34)$$

donde $P_{[v]J}^i$ es la población del nivel rotacional J en el estado vibracional $[v]$ y $P_{[v]}^i$ es la población del estado vibracional $[v]$, evaluadas ambas en la posición de la envoltura i . El estado con subíndice $[v] + 1$ es el siguiente a $[v]$ en energía. La energía del estado vibracional $[v]$, $E_{[v]}$, es la energía del nivel rotacional con $J = 0$ de ese estado. Para los estados vibracionales con momento angular vibracional $\ell \neq 0$, en los que el primer nivel rotacional existente tiene $J = \ell$, esa energía es la que tendría el estado con $J = 0$ si existiera.

Además de lo anterior, debe cumplirse que ninguna temperatura sea menor que la del fondo cósmico de microondas ($T_{\text{CMB}} \simeq 2.73$ K). Con esto cerramos el proceso de introducción de temperaturas relativas al gas (tanto de excitación como cinética), no sin antes comentar que todas ellas son tomadas iguales a T_K a no ser que se diga lo contrario.

3.3.5. Temperatura del polvo

La temperatura del polvo, T_d , es la temperatura a la que están los granos de polvo y que controla la radiación que emiten, ya que los granos son sólidos que se comportan como cuerpos grises (hipótesis 9). El modelado del continuo de la envoltura depende en gran medida de la ley que escojamos para T_d , además de la composición de los granos, puesto que la parte de la radiación procedente de la estrella es absorbida y reemitida posteriormente a frecuencias menores por los granos de polvo. En consecuencia, si la componente de polvo de la envoltura es ópticamente opaca, casi toda la radiación estelar es procesada por los granos mientras que si la envoltura es ópticamente transparente, el polvo sólo procesa una pequeña parte, permitiéndonos observar la estrella directamente. T_d es, pues, una magnitud importante.

Si consideramos una envoltura de polvo ópticamente transparente, imponiendo la condición de que la única dependencia temporal existente relacionada con la emisión de radiación por parte del polvo debe proceder de la expansión de la envoltura (hipótesis 2) y

suponiendo que la sección eficaz de absorción $\sigma_{\nu}^{a,d} \propto \nu^p$, ha de cumplirse que toda la radiación absorbida por el polvo debe ser reemitida de nuevo y $T_d \propto r^{-2/(4+p)}$ (la justificación matemática se puede ver en el Apéndice A.6; Sopka et al., 1985).

Desgraciadamente, al contrario que en el caso ópticamente transparente, en el ópticamente opaco no existe una expresión sencilla para el flujo promedio en un punto dado de la envoltura y no es posible encontrar una ley analítica del tipo anterior sin imponer condiciones más fuertes. Aún así, si bien el flujo promedio puede tener una dependencia muy complicada con r , parece una aproximación aceptable el suponer que el flujo promedio cae más lentamente con el radio si la CSE es ópticamente opaca que si es delgada. Entonces, $\bar{J}_{\nu} \propto r^{-q}$, donde q es un número real positivo menor que 2. Esta dependencia sugiere que T_d se puede aproximar mediante una ley de potencias decreciente, como en el caso de la CSE ópticamente transparente.

Es por ello por lo que usaremos $T_d \propto r^{-\alpha_d}$, tomando α_d como un parámetro libre del modelo y, de hecho, permitiremos distintos valores de α_d para las diferentes regiones. En las CSEs de las estrellas AGB esperamos que ese exponente se pueda tomar como constante en toda la envoltura (en primera aproximación) pero no así en las PPNe. Al estar estas fuentes en una fase de rápida evolución, las propiedades de la región externa de su envoltura pueden ser similares a las de una estrella AGB y diferir de ellas en sus zonas interna e intermedia.

3.3.6. Densidad y opacidad del gas

La densidad del gas se obtiene a partir de la expresión del flujo de materia eyectado por la estrella. Suponiendo geometría esférica,

$$\dot{M} = 4\pi r^2 \sum_{i=1}^k n_i(r) m_i v(r), \quad (3.35)$$

donde n_i y m_i son la densidad y la masa de la especie molecular i -ésima y k es el número de especies distintas. Ya vimos, al hablar del proceso de aceleración que sufre el gas al ser eyectado en la Sección 1.1.3.3, que la especie más numerosa es el hidrógeno molecular siendo la abundancia de otras especies mucho menor, excepto para el caso del He que supondremos tiene abundancia solar ($x(\text{He}) \simeq 0.2$, Cox 2000), aunque permitiremos la variación de la abundancia de He por si fuera necesario. Podremos suponer entonces que:

$$\dot{M} \simeq 4\pi r^2 \mu m_{\text{H}_2} n_{\text{H}_2}(r) v(r), \quad (3.36)$$

donde $\mu = \sum_{i=1}^m m_i/m_{\text{H}_2} x_i$, con i variando desde 1 hasta el número máximo de especies moleculares y atómicas y estando ordenado según abundancias decrecientes. De ese modo, $\mu = 1 + m_{\text{He}}/m_{\text{H}_2} x(\text{He}) + \dots \simeq 1 + 2 \times 0.2 = 1.4$. Se puede ver la representación del perfil de densidad de IRC+10216 en la Figura 1.7(a).

La opacidad de una capa de gas de longitud s compuesto por m especies puede ser expresada de este modo:

$$k_{\nu} = \sum_{i=1}^k \int_0^s n_i(s) \sigma_{\nu,i}(s) ds, \quad (3.37)$$

donde el subíndice i indica la especie absorbente y $\sigma_{\nu,i}$ es la sección eficaz de absorción. En el caso de que la sección eficaz de absorción sea constante en esa capa (porque la abundancia de la especie i y sus temperaturas sean constantes),

$$k_{\nu} = \sum_i \sigma_{\nu,i} N_{\text{col},i}, \quad (3.38)$$

tomando $N_{\text{col},i}$ como la densidad de columna de la especie i . Esta forma de escribir la opacidad de la especie molecular i -ésima es adecuada para introducirla en el modelo ya que la envoltura está discretizada en volúmenes con características físicas constantes.

3.3.7. Abundancias moleculares

La dependencia espacial de las abundancias moleculares pueden ser muy complicadas porque dependen directamente de la evolución química de la envoltura. Por ello, la única manera de obtener resultados experimentales realistas y precisos es proponer la hipótesis 4. Así pues, incluiremos en el modelo la posibilidad de utilizar abundancias distintas para cada especie molecular en cada una de las tres regiones de la CSE, a la vez que imponemos que éstas abundancias sean constantes en éstas, es decir, obtendremos promedios espaciales. Esta elección reduce casi a la mínima expresión la dificultad de los ajustes y los resultados derivados son físicamente representativos y pueden servir de restricciones a posteriores estudios con modelos químicos.

3.3.8. Densidad y opacidad del polvo

El mecanismo de aceleración de granos de polvo propuesto en la Sección 1.1.3.3 sugiere que es posible asumir en buena aproximación que el polvo se expande a una velocidad constante en toda la envoltura. Por otro lado, como vimos en la Sección 3.3.3, no es posible determinar adecuadamente la velocidad de expansión del polvo, lo que supone no poder obtener una expresión realista de la densidad por medio de la conservación del flujo de masa en forma de polvo. Sin embargo, esa ley proporciona la dependencia con el radio de esta magnitud: $n_d(r) \simeq \dot{M}_d(4\pi r^2 m_g v_d)^{-1} \propto r^{-2}$, donde m_g es la masa de un grano genérico (recordemos que en virtud de la hipótesis 8 no consideramos ni distribución en tamaños ni crecimiento de los granos; más adelante utilizaremos la expresión anterior). Una vez conocida esta dependencia y utilizando la profundidad óptica de la envoltura, se puede obtener una expresión matemática para la densidad que no contenga la velocidad de expansión.

Los granos de polvo tienen una sección eficaz de absorción que depende de la longitud de onda de la radiación incidente y de la geometría del propio grano. Sean las secciones eficaces de absorción $\sigma_{\lambda_0, I}^{a,d}$, $\sigma_{\lambda_0, II}^{a,d}$ y $\sigma_{\lambda_0, III}^{a,d}$ en las Regiones I, II y III respectivamente y evaluadas para una longitud de onda λ_0 . Consideremos la densidad de granos de polvo siguiente:

$$n_d(r) = \begin{cases} n_0(r/R_* - 1)/(R_{d1}/R_* - 1) & R_* \leq r < R_{d1}, \\ n_0 (R_{d1}/r)^2 & R_{d1} \leq r < R_{d2}, \\ n'_0 (R_{d2}/r)^2 & R_{d2} \leq r \leq R_{ext}, \end{cases} \quad (3.39)$$

donde n_0 es la densidad de granos en R_{d1} y n'_0 es la densidad de granos en R_{d2} . Escribiendo la profundidad óptica de toda la envoltura desde la fotosfera estelar hasta el radio externo de la envoltura R_{ext} (el desarrollo matemático completo se puede ver en el Apéndice A.7):

$$\tau_{\lambda_0}^d = n_0 \sigma_{\lambda_0, II}^{a,d} R_{d1} \left[\frac{1}{2} \frac{\sigma_{\lambda_0, I}^{a,d}}{\sigma_{\lambda_0, II}^{a,d}} \left(1 - \frac{R_*}{R_{d1}} \right) + (1 + \eta) \left(1 - \frac{R_{d1}}{R_{d2}} \right) \right], \quad (3.40)$$

donde η es el cociente entre las profundidades ópticas de la Región III y la II,

$$\eta = \frac{\tau_{\lambda_0, III}}{\tau_{\lambda_0, II}} = \frac{n_{d2, III} \sigma_{\lambda_0, III}^{a,d} R_{d2} (1 - R_{d2}/R_{ext})}{n_{d2, II} \sigma_{\lambda_0, II}^{a,d} R_{d1} (1 - R_{d1}/R_{d2})}, \quad (3.41)$$

siendo $n_{d2, III} = \lim_{r \rightarrow R_{d2}^+} n(r)$ y $n_{d2, II} = \lim_{r \rightarrow R_{d2}^-} n(r)$. El cociente $n_{d2, III}/n_{d2, II}$ tiene en cuenta la posible aparición de una discontinuidad en la densidad de granos en R_{d2} , es decir, de una variación abrupta del ritmo de condensación del gas en granos de polvo. Este hecho puede ser debido a un fenómeno de cambio rápido de ritmo de eyección de materia por parte de la estrella en épocas anteriores al momento considerado, como en el caso de la expulsión de la atmósfera de una estrella AGB antes de convertirse en PPN. Así pues,

mediante la Ec. 10.28 es posible obtener el valor de n_0 a partir de la profundidad óptica, las secciones eficaces de absorción y el parámetro η .

La sección eficaz de absorción se puede definir del siguiente modo:

$$\sigma_{\lambda}^{a,d} = \sigma_g Q_{\text{abs}}(\lambda) = \sigma_g \frac{\tilde{Q}_{\text{abs}}(\lambda)}{\lambda} \quad (3.42)$$

donde, para el caso de un grano esférico de pequeño tamaño

$$\tilde{Q}_{\text{abs}}(\lambda) = -8\pi r_g \text{Im} \left[\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right], \quad (3.43)$$

con $Q_{\text{abs}}(\lambda)$ es la razón entre la sección eficaz electromagnética y la geométrica, r_g el radio del grano y $m = n - ik$ el índice de refracción complejo³. Operando se obtiene que:

$$\text{Im} \left[\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right] = -\frac{6nk}{(n^2 - k^2 + 2)^2 + 4n^2k^2}. \quad (3.44)$$

El desarrollo completo de la anterior expresión se puede encontrar en el Apéndice A.5. En las dos fuentes que estudiaremos en esta Tesis, se ha observado que la mayor parte del polvo circunestelar está compuesto por dos especies: el carbono amorfo y el SiC cristalino. En la literatura existen datos experimentales relativos tanto al carbono amorfo (Rouleau & Martin, 1991) como al SiC cristalino (Mutschke et al., 1999), aunque dependiendo de la estructura cristalina la sección eficaz de absorción puede variar bastante. Como además no es necesario ajustar perfectamente el continuo, hemos elegido utilizar el SiC amorfo del que Mutschke et al. (1999) dan las propiedades ópticas (ver Figura 3.3). De este modo es posible obtener un ajuste del continuo con precisiones mayores que el 10%.

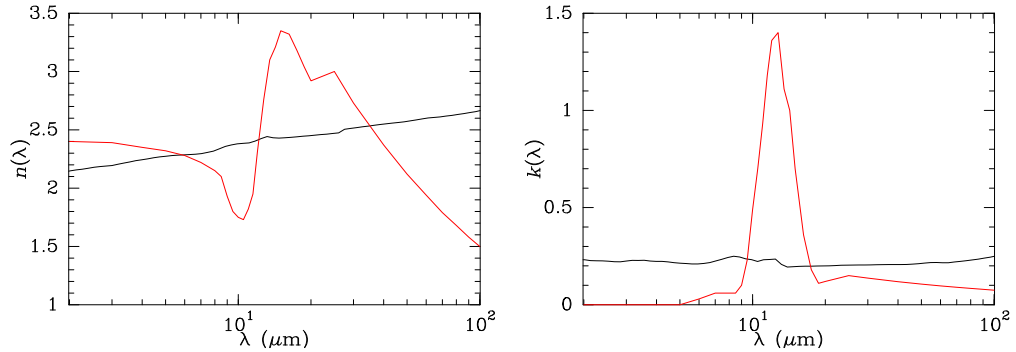


FIGURA 3.3.— Constantes ópticas del carbono amorfo y el SiC amorfo. La figura de la derecha muestra en negro la parte real del índice de refracción $m = n - ik$ del carbono amorfo y en rojo la del SiC amorfo. En la figura de la derecha se muestra la parte compleja (sin el signo $-$) de m igualmente en negro para el carbono amorfo y en el rojo para el SiC amorfo. El pico en n y k para el SiC amorfo da lugar a la banda a $11.3 \mu\text{m}$ observada en el polvo inter y circunestelar. Los datos representados del carbono y el SiC amorfos se han tomado de Rouleau & Martin (1991) y Mutschke et al. (1999), respectivamente.

En cuanto al tamaño de los granos, todas las investigaciones previas parecen indicar que la hipótesis 8 se cumple en el rango de frecuencias estudiado ($700 - 900 \text{ cm}^{-1}$). Además,

³La expresión de $Q_{\text{abs}}(\lambda)$ se obtiene al tratar el problema de la interacción de radiación electromagnética con pequeñas partículas (Teoría de Mié; Hoyle & Wickramasinghe, 1991, Cap. 2). En especial, se utiliza la aproximación asintótica para pequeñas esferas homogéneas. Esta aproximación supone que $2\pi r_g/\lambda \ll 1$ y se cumple más o menos bien para granos con un radio de $0.05 \mu\text{m}$ para las longitudes de onda consideradas en este estudio ($\sim 10 \mu\text{m}$).

la radiación con estas frecuencias no sufre apenas dispersión y el tamaño de los granos no es importante. Por ello el modelo no contempla este proceso y, en consecuencia, no puede ser utilizado para estudiar radiación con $\lambda \lesssim 1 \mu\text{m}$, donde sí es importante la dispersión (Ivezić & Elitzur, 1996). En el Apéndice A.8 se puede ver la justificación de que el tamaño de los granos es poco importante en la absorción de radiación con $\lambda \gtrsim 10 \mu\text{m}$, siempre que se cumpla que son esferas pequeñas ($2\pi r_g/\lambda \ll 1$).

3.3.9. Intensidad de línea

En este modelo no resolvemos las ecuaciones de equilibrio estadístico sino que suponemos los perfiles de temperatura (cinética, rotacional y vibracional) y densidad necesarios y proponemos un campo de velocidades de expansión para la envoltura gaseosa. Con toda esta información, para resolver el problema radiativo tan sólo son necesarios los momentos dipolares, el espectro y las constantes espectroscópicas de cada molécula, que se pueden encontrar en base de datos como HITRAN o en la literatura (ver Capítulo 2).

Este proceso de cálculo se basa principalmente en la interacción entre la radiación y la materia existentes en el entorno de un punto en la CSE. Para una transición de una molécula dada, es posible proponer una expresión para la intensidad de línea utilizando la aproximación de dos niveles (similar a la Ec. 2.13 pero más general; se puede ver una reescritura más adecuada para su implementación y adaptada para las moléculas lineales en el Apéndice A.3):

$$S_{lu} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{g_l^s \nu_{lu}}{Z} \frac{1}{g_v} |R|^2 L(J, \ell) \frac{1}{g_l} \frac{n_l}{n_f} \left(1 - \frac{g_l}{g_u} \frac{n_u}{n_l} \right), \quad (3.45)$$

donde $1/4\pi\epsilon_0 = 10^{-36} \text{ erg cm}^3 \text{ D}^{-2}$, $|R|^2$ está expresado en D^2 , ν_{lu} es la frecuencia de la línea en cm^{-1} , g_l^s es la degeneración del nivel inferior debida al espín nuclear, $L(J, \ell)$ es la fuerza de línea, g_v es un factor que vale 2 para transiciones en las que tanto el nivel superior como el inferior están desdoblados por interacción entre el momento angular vibracional total y el momento angular total molecular y 1 para el resto⁴, g_l es la degeneración total del nivel inferior, n_f la población del nivel fundamental y Z es la función de partición total de la molécula (incluido el espín nuclear).

3.3.10. Perfiles de línea

La expresión anterior nos proporciona el valor de la intensidad completa de la línea. Esa intensidad ha de estar distribuida para cada frecuencia con el fin de considerar que en las transiciones no se emite o absorbe a una única frecuencia, es decir, que la línea tiene un perfil. Según la hipótesis 6, los perfiles son del tipo:

$$\Phi_g(\nu) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-(\nu-\nu_0)/\sigma^2}, \quad (3.46)$$

donde ν_0 es el centro de línea y la semianchura es σ . Escribiendo la intensidad de línea en función de la frecuencia y en función de la FWHM, $\Delta\nu$:

$$S_\nu = S_{lu} \frac{2\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi}} \frac{c}{\nu_0 \Delta\nu} e^{-4c^2 \ln 2 (\nu-\nu_0)^2 / \nu_0^2 (\Delta\nu)^2}, \quad (3.47)$$

donde $\Delta\nu$ y c están expresados en km s^{-1} .

Además de los anteriores perfiles hay una infinidad de formas que puede adoptar una línea debido a las características físicas de un sistema. Este es el caso de cualquier sistema

⁴Este factor se coloca por convenio aunque hay autores para los que siempre vale 1. Como la mayor parte de los datos utilizados en este trabajo proceden de la base de datos HITRAN y los valores que en ella se exponen utilizan este convenio, nosotros haremos lo mismo.

que contenga gas con campos de velocidad complejos como pueden ser envolturas circunestelares o nebulosas planetarias. Estos perfiles son la envoltura de muchos perfiles individuales. El tipo de perfil que vamos a utilizar en esta Tesis es el de *tipo P-Cygni* además de los típicos perfiles obtenidos en radiofrecuencias de tipo parabólico o de U. Los perfiles P-Cygni tienen la particularidad de que una parte del perfil está en emisión y la otra en absorción. Aparecen debido a un efecto cinemático y por los diferentes tamaños de la fuente molecular y la fuente del continuo. Los perfiles parabólicos (con una forma parecida a una parábola) están generados por la emisión de radiación por especies moleculares que se extienden desde la zona interna de las envolturas circunestelares hasta las zonas externas. Por otro lado, los perfiles en forma de U son generados también en las CSEs por especies moleculares que existen únicamente en las capas externas de la envoltura.

3.3.11. Anchura de línea

3.3.11.1. Anchura térmica

La anchura de una línea gaussiana para una especie molecular x que forma parte de un gas a temperatura T_K es $2\sigma_x(T_K)$ con

$$\sigma_x(T_K) = \sqrt{\frac{2k_B T_K}{m_x}} \times 10^{-5}, \quad (3.48)$$

donde los parámetros físicos están expresados en unidades cgs, $\sigma_x(T_K)$ en km s^{-1} y m_x es la masa de una molécula de la especie x . La anchura a media altura para esta especie x , FWHM_x o Δv_x :

$$\Delta v_x(T_K) = 2\sqrt{\frac{2k_B T_K}{m_x} \ln 2} \times 10^{-5} \quad (3.49)$$

en las mismas unidades que $\sigma_x(T_K)$.

La temperatura cinética decrece con la distancia a la estrella produciendo anchuras de línea del tipo anterior hasta llegar a la envoltura externa donde se observan anchuras constantes, como en el caso de IRC+10216, donde se derivan anchuras de microturbulencia para el CO de $\simeq 1 - 2 \text{ km s}^{-1}$ (Huggins & Healy, 1986).

3.3.11.2. Anchura de microturbulencia

La anchura de línea cerca de la fotosfera no ha sido bien determinado todavía en observaciones previas de IRC+10216. La eyección de materia cerca de la estrella podría incrementar la velocidad de microturbulencia, añadiendo una contribución no térmica a la anchura de línea. En nuestro código, hemos esta contribución como $\Delta v_{m,1} e^{-(r-1)/\ell}$, donde $\Delta v_{m,1}$ es la velocidad de microturbulencia no térmica sobre la fotosfera y ℓ es una longitud característica (r y ℓ están expresados en R_*). Como las líneas afectadas por efectos térmicos y de microturbulencia presentan perfiles gaussianos, la anchura de línea resultante es $(\Delta v)^2 = (\Delta v_{\text{térmica}})^2 + (\Delta v_{\text{microturbulencia}})^2$. Para obtener parámetros físicamente representativos de nuestro código, el parámetro que hemos usado es la anchura total de la línea en la fotosfera, Δv_1 . Las líneas rovibracionales de alta energía (bandas calientes), que se forman en la fotosfera, podrían llevar información sobre estos parámetros.

3.3.12. Función de partición

La función de partición la calculamos mediante la suma directa de las contribuciones de cada uno de los niveles rovibracionales,

$$Z = g_0 \sum_{[v]\ell J}^{\left([v]\ell J\right)_{\max}} \frac{n_{[v]\ell J}}{n_0}, \quad (3.50)$$

donde n_0 y g_0 son la densidad de partículas y la degeneración en el estado fundamental y se suman todos los niveles posibles hasta un nivel máximo, debiéndose cumplir las siguientes condiciones:

1. Para cada estado vibracional se suman al menos todos los niveles rotacionales con $J \leq J_{\max}$,
2. la contribución relativa a la función de partición rotacional del último nivel rotacional de cada estado vibracional debe ser menor que 10^{-3} , lo que tal vez implique el tener que sumar niveles con $J > J_{\max}$,
3. el estado vibracional de mayor energía, v_{\max} (donde v indica la posición en energías de un estado vibracional dado), debe ser mayor que el correspondiente al nivel rotacional superior involucrado en la transición considerada, y
4. la contribución relativa a la función de partición molecular de v_{\max} (incluyendo la función de partición rotacional) debe ser menor que 10^{-3} , lo cual puede implicar la necesidad de sumar estados vibracionales con $v > v_{\max}$.

Para las temperaturas rotacionales que prevalecen cerca de la fotosfera estelar (en el caso de IRC+10216), la Condición 2 implica que el nivel rotacional superior que es necesario que se incluya en los modelos para el C_2H_2 está entre $J = 116 - 130$, dependiendo del estado vibracional. Las Condiciones 3 y 4 implican que $v_{\max} = 110$ para el gas muy cercano a la estrella. Por otro lado, para T_K pequeña e intermedia, el mayor nivel rotacional incluido que cumple la Condición 2 está claramente por debajo de $J_{\max} = 65$, es decir, para $T_{\text{rot}} \simeq 400$ K el error de la función de partición es igual a 10^{-3} para $J \simeq 32$, en promedio, aunque hemos impuesto que se sume hasta $J = J_{\max}$ y $v = v_{\max}$ para que se cumplan las Condiciones 1, 3 y 4.

3.3.13. Cálculo del flujo

3.3.13.1. Flujo emitido por el sistema

La mejor manera de abordar este problema es empezar a sumar las contribuciones de todas las regiones con la misma coordenada x desde la más cercana a nosotros (ver Figura 3.4). Así se calcula la energía emitida en la dirección de observación y la opacidad de esa región, siendo esta opacidad necesaria para el cálculo de la atenuación que sufre la radiación emitida por la segunda región. De esta manera, el cálculo del flujo se puede hacer de una vez sin necesidad de guardar en memoria los datos referentes a cada región.

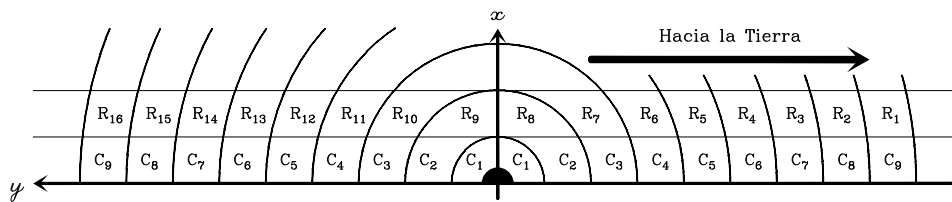


FIGURA 3.4.— Esquema de la discretización de la envoltura de IRC+10216. Es posible reducir el problema tridimensional a uno bidimensional en las coordenadas x e y porque el sistema es axialmente simétrico. Los nombres C_1 - C_9 indican el número de capa (esférica) en este esquema simplificado. Las regiones R_1 - R_{16} son las regiones con la misma coordenada x (todas las regiones cuya proyección sobre la esfera celeste coinciden). El flujo emitido en la coordenada x es la suma de las contribuciones de todas las regiones de R_1 a R_{16} .

Dado que cada región tiene densidad y temperaturas constantes, se puede usar la solución de la ecuación de transferencia de radiación para una función fuente constante. Así pues,

$$I_\nu = I_{\nu,0}e^{-\tau_\nu} + S_\nu (1 - e^{-\tau_\nu}), \quad (3.51)$$

donde S_ν es la función fuente, $I_{\nu,0}$ es la intensidad que entra en el sistema por el lado opuesto a donde observamos y τ_ν es la profundidad óptica específica de cada región definida como $\tau_\nu = \int_0^s k_\nu n(s) ds = k_\nu N_{\text{col}}$ (k_ν es constante en cada región).

En virtud de la hipótesis 3, el sistema está aislado, lo que quiere decir (esquemáticamente) que $I_{\nu,0} = 0$ en la región R_{16} de la Figura 3.4.

La contribución a la función fuente utilizada procedente del polvo es la función de Planck a la temperatura T_d y la función fuente derivada del estudio de un sistema de dos niveles en el caso molecular (ver Ec. 3.11). La función fuente total podemos tomarla como compuesta por las funciones fuente corregidas por el efecto Doppler que aparece como consecuencia de la expansión de la envoltura⁵. La función fuente del polvo es lo suficientemente suave como para no necesitar ser corregida. Sin embargo, esta corrección sí es necesaria en el caso molecular. La función fuente molecular es, entonces:

$$S_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2} \left(\frac{1}{1 - v_{\parallel}/c} \right)^3 \frac{1}{(n_u/n_l)^{1/(1-v_{\parallel}/c)} - 1}, \quad (3.52)$$

donde v_{\parallel} es la proyección de la velocidad de expansión sobre la dirección de observación, siendo positiva cuando existe un desplazamiento hacia el rojo y negativa cuando ese desplazamiento es hacia el azul.

Como la intensidad específica es la energía que atraviesa la unidad de área en la unidad de tiempo en una dirección (en realidad en todas las direcciones seleccionadas por la unidad de ángulo sólido en torno a esa dirección principal) y que está compuesta por luz con frecuencias ν entre ν y $\nu + d\nu$, seleccionando la energía en la dirección de observación obtendremos el flujo emitido hacia nosotros.

La intensidad emergente en la dirección de observación para cada coordenada x es la siguiente:

$$\begin{aligned} I_\nu(x) = & S_\nu^{(1)} (1 - e^{-\tau_\nu^{(1)}}) + \\ & + S_\nu^{(2)} (1 - e^{-\tau_\nu^{(2)}}) e^{-\tau_\nu^{(1)}} + \\ & + S_\nu^{(3)} (1 - e^{-\tau_\nu^{(3)}}) e^{-\tau_\nu^{(1)} - \tau_\nu^{(2)}} + \\ & + S_\nu^{(4)} (1 - e^{-\tau_\nu^{(4)}}) e^{-\tau_\nu^{(1)} - \tau_\nu^{(2)} - \tau_\nu^{(3)}} + \\ & + S_\nu^{(5)} (1 - e^{-\tau_\nu^{(5)}}) e^{-\tau_\nu^{(1)} - \tau_\nu^{(2)} - \tau_\nu^{(3)} - \tau_\nu^{(4)}} + \dots, \end{aligned} \quad (3.53)$$

donde $S_\nu^{(i)}$ es la función fuente en la región i modificada por efecto Doppler debido a la velocidad de esa región relativa al sistema de referencia de la estrella y $\tau_\nu^{(i)}$ es la profundidad óptica de esa misma región i . Reescribiendo la suma anterior de una manera más compacta tenemos,

$$I_\nu(x) = \sum_{i=1}^{n_x} S_\nu^{(i)} (1 - e^{-\tau_\nu^{(i)}}) e^{-\sum_{j=1}^{i-1} \tau_\nu^{(j)}}, \quad (3.54)$$

donde la suma de la segunda exponencial vale cero si $i = 1$ y n_x es el número de regiones emisoras con proyección en la posición x .

El flujo observado, e_ν , generado por todas las regiones en la CSE con la misma coordenada x viene dado por la expresión siguiente (se puede ver el desarrollo completo en el

⁵A pesar de que el sistema se mueve como un todo hacia nosotros, no consideraremos esa velocidad del centro de masas por tener un efecto sobre la forma del espectro fácilmente subsanable y global: basta con corregir los datos observacionales del efecto Doppler producido por la velocidad promedio del sistema mediante un cambio de escala. Más adelante veremos cómo se puede hallar dicha velocidad.

Apéndice A.4):

$$e_\nu(x) \simeq \frac{\pi}{4} \frac{1}{\ln 2} \left(\frac{\Delta}{206265} \right)^2 I_\nu(x) \left(e^{-4 \ln 2 x_1^2 \alpha^2 / \Delta^2} - e^{-4 \ln 2 x_2^2 \alpha^2 / \Delta^2} \right), \quad (3.55)$$

donde por simplicidad hemos considerado el haz principal como una función gaussiana, $x = (x_1 + x_2)/2$, α es el radio angular de la estrella en segundos de arco, Δ es el HPBW o anchura del haz principal del telescopio también en segundos de arco y x_1 y x_2 , que son las posiciones interna y externa correspondiente a la capa estudiada, (y por lo tanto x) están medidos en R_* .

Una vez que conocemos el flujo observado emitido por cada anillo del sistema, podemos sumarlos todos y obtendremos el flujo total observado, e_ν^t , es decir, el flujo que entra en el telescopio.

$$e_\nu^t \simeq \frac{\pi}{4} \frac{1}{\ln 2} \left(\frac{\Delta}{206265} \right)^2 \sum_{i=1}^{n-1} I_{\nu,i} \left(e^{-4 \ln 2 x_i^2 \alpha^2 / \Delta^2} - e^{-4 \ln 2 x_{i+1}^2 \alpha^2 / \Delta^2} \right), \quad (3.56)$$

siendo $I_{\nu,i}$ la intensidad emergente del anillo i -ésimo.

3.3.13.2. La rendija de entrada del monocromador

La utilización de monocromadores en las observaciones espectroscópicas implica la inclusión de una rendija de entrada con geometría rectangular en un sistema con simetría cilíndrica, como en el caso envoltura circunestelar-telescopio. La introducción de este nuevo elemento, al contrario de ser complicada por la ruptura que produce en la simetría del sistema, es relativamente sencilla al darnos cuenta de que lo único que introduce en la Ec. 3.56 es una corrección al ángulo sólido subtendido por cada anillo.

Es posible simular aproximadamente la rendija de entrada del monocromador hallando el ángulo sólido de cada anillo que se ve a través de la rendija (ver Figura 3.5). Tomando

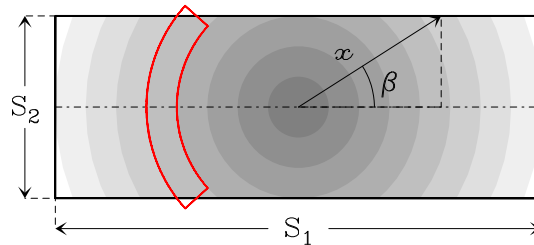


FIGURA 3.5.— Vista de la estrella AGB esquematizada durante este Capítulo a través de la rendija del monocromador. La inclusión de una rendija con dimensiones S_1 y S_2 antes del detector modifica el ángulo sólido que subtende cada anillo. De ese modo, los anillos más internos no quedan modificados por la rendija mientras que los externos sí lo son, perdiéndose gran parte del flujo emitido por la componente más fría de la envoltura. Si el ángulo sólido subtendido por un anillo es Ω y si la rendija afecta a ese anillo, el ángulo sólido subtendido que vemos a través de la rendija es $(\Omega/2\pi)4\beta$, donde β depende de x (el radio del anillo). De este modo, la emisión seleccionada por la rendija se puede aproximar a la emitida por regiones del tipo de la representada en rojo en la Figura. La rendija cambia ligeramente de forma tomando su lado largo una apariencia de sierra mientras que el corto pasa de ser una línea a un arco (ver texto para más información).

un anillo de radio $x = (x_{i+1} + x_i)/2$ únicamente se pueden observar dos partes del anillo que se corresponden con dos arcos de 2β radianes cada uno, siendo $\beta = \arcsin(S_2/2\alpha_*x)$ con S_2 y α_* expresados en segundos de arco y x expresado en R_* . Por lo tanto, la fracción

f_R del ángulo sólido subtendido por este anillo que se ve a través de la rendija es

$$f_R = \frac{4\beta}{2\pi} = \frac{2}{\pi} \arcsen \frac{S_2}{2\alpha_* x}. \quad (3.57)$$

El aprovechamiento de la simetría cilíndrica para simular la rendija tiene como consecuencia una deformación de ésta. Utilizando la expresión anterior nos es posible ajustar perfectamente la circunferencia central de cada anillo pero no así los bordes. Es por ello que la rendija deformada presenta los lados más largos con forma de sierra y los más cortos con forma de arco. Si el número de anillos considerados es pequeño, las diferencias entre la rendija simulada y la real son bastante grandes pero conforme aumentemos el número de anillos estas diferencias se reducirán paulatinamente. En cualquier caso, esta deformación de la rendija produce ligeras variaciones en el espectro observado generado por el modelo, aunque de ningún modo lo suficientemente grandes como para dar lugar a modificaciones significativas en los resultados. Esta afirmación está sustentada por dos razonamientos sencillos:

1. Cada anillo es axialmente simétrico y es la proyección sobre el cielo de regiones homogéneas según la coordenada x . Además, el área de las zonas consideradas que quedan fuera de la rendija es la misma que la de aquéllas que no se consideran dentro. Así, las zonas consideradas fuera de la rendija emiten el mismo flujo que deberían emitir las zonas que no consideramos y que están dentro de la rendija. En consecuencia, el flujo observado por cada anillo es el mismo que observaríamos al tomar una rendija exactamente igual a la real.
2. La consideración de que los lados de la rendija simulada sean curvos aumenta en una pequeña cantidad el flujo observado en comparación con el que observaríamos si utilizáramos una rendija como la real. No obstante, como en general la rendija de entrada del monocromador es bastante más larga que ancha ($S_1 \gg S_2$) ese incremento en el flujo procede de las regiones más frías de la envoltura y es muy pequeño en comparación con el flujo emitido por las regiones internas.

3.3.13.3. Detección

Una vez estudiada la respuesta del telescopio, es necesario modelar la respuesta del detector cuando esa luz llega hasta él. Supongamos un detector multicanal donde cada canal tiene una respuesta gaussiana, Ψ_ν , siendo su FWHM $\delta\nu$ y su poder de resolución $R = \nu/\delta\nu$. Entonces, el espectro detectado, e_ν^* , es simplemente la convolución del espectro e_ν^t con la función de respuesta del detector.

$$e^*(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} e^t(\nu') \Psi(\nu - \nu') d\nu'. \quad (3.58)$$

En el caso del un detector ideal, la función de respuesta es una delta de Dirac. Así pues, el flujo recibido convolucionado es:

$$e^*(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} e^t(\nu') \delta(\nu - \nu') d\nu' = e^t(\nu) \quad (3.59)$$

y $e_\nu^* = e_\nu^t$. Si por el contrario, el detector no tiene una resolución espectral infinita, se mezclan contribuciones a distintas frecuencias, limitando la resolución espectral la cantidad de información contenida en los perfiles de línea observados.

3.3.14. Introducción de perturbaciones puntuales

Hasta el momento hemos expuesto el desarrollo de un modelo de estrella AGB o PPN con simetría esférica. Pero es lógico pensar que en muchos casos las CSEs de las estrellas

observadas tengan irregularidades que de algún modo rompan la simetría esférica, como es el caso de CRL618 (ver Capítulo 6). Es por ello que en esta Sección vamos a modificar de la forma más sencilla posible el modelo esférico para poder incluir irregularidades puntuales a modo de grumos o nódulos en una zona aleatoria de la CSE. Para ello únicamente hemos de tener en cuenta que el espectro observado por el telescopio de un sólo disco procede de la envoltura *completa*, ya que en el proceso de observación se suman todas las contribuciones al flujo generadas por regiones emisoras con diferentes parámetros de impacto.

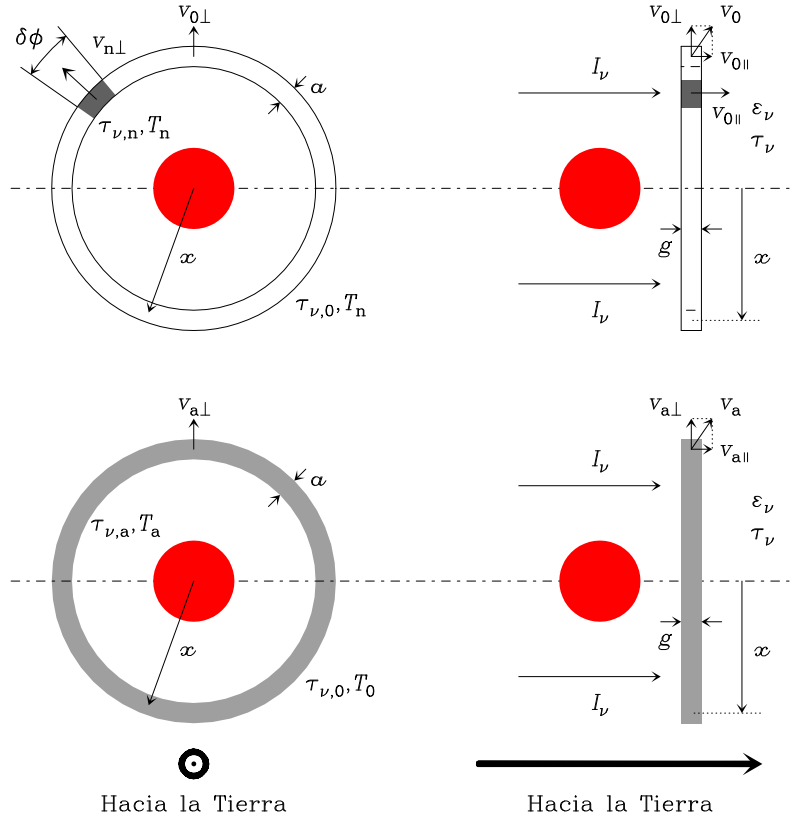


FIGURA 3.6.— Equivalencia nódulo-anillo. Tanto la Figura superior como la inferior muestran la vista de frente y lateral de dos sistemas similares: la Figura superior representa el sistema real, formado por un nódulo (en gris oscuro) en una posición determinada de la CSE y con unas características dadas (anchura a , grosor g , profundidad óptica $\tau_{\nu,n}$, temperatura de excitación T_n y velocidad de expansión v_n). El resto del anillo está compuesto por gas con propiedades físicas acordes al resto de la envoltura (ver las Secciones anteriores de este Capítulo), siendo la temperatura de excitación T_0 , la profundidad óptica $\tau_{\nu,0}$ y la velocidad de expansión v_0 . Por otro lado, la Figura inferior representa un sistema prácticamente equivalente formado por dos componentes con la misma geometría que en el anterior caso pero con distintas características físicas (en gris claro; $\tau_{\nu,a}$, T_a y v_a para la componente que simula al nódulo y $\tau_{\nu,0}$, T_0 y v_0 , para la que simula al resto del anillo). El material que está entre el anillo y nosotros tiene una profundidad óptica τ_ν y una emisividad ϵ_ν . Suponiendo que la estrella está a una distancia D de nosotros, el ángulo sólido subtendido por el nódulo es $\delta\Omega = ax\delta\phi/D^2$ mientras que el subtendido por el anillo completo es $\Omega = 2\pi ax/D^2$, donde x es la distancia de la línea de mirada al punto central del nódulo o a la circunferencia que equidista de los bordes del anillo.

Debido a la simetría cilíndrica del sistema fuente-telescopio, la contribución al espectro observado de dos regiones de igual tamaño de un anillo de radio x y con una anchura,

a , y un grosor, g , pequeños es la misma si todas las magnitudes de la CSE tienen simetría cilíndrica o esférica (ver Figura 3.6). En el caso de que el flujo emitido por las regiones elegidas no fuera el mismo pero la velocidad proyectada v_{\parallel} sí lo fuera, la contribución de ese anillo al flujo observado sería la suma de los flujos emitidos por cada punto. De ese modo, en el proceso de observación perdemos información relativa a la distribución axial del flujo emitido (en el sistema fuente-telescopio).

Suponiendo entonces un anillo dividido en n regiones iguales tales que el flujo emitido por cada una de estas regiones (salvo en una de ellas) fuese el mismo, detectaríamos una pequeña modificación en el espectro con respecto al caso del anillo sin esa región anómala, pero *siéndonos imposible determinar la posición de esa región* dentro del anillo. Las posibles velocidades de expansión distintas para las regiones del anillo podrían darnos indicios acerca de la presencia de inhomogeneidades pero seguiría faltando información geométrica sobre el sistema. En el caso límite de tener un anillo que no emitiera ningún tipo de radiación excepto en un pequeño arco, no podríamos averiguar si el flujo observado ha sido emitido por un anillo o por un arco.

Es decir, parece posible establecer una relación de equivalente (o próxima a ella) entre la emisión de una pequeña región en algún punto de la CSE y un anillo con emisión homogénea. Supongamos entonces un anillo formado por el gas que esperaríamos encontrar en una CSE esféricamente simétrica (*gas esférico*) con una profundidad óptica τ_0 , a una temperatura T_0 y que se expande a una velocidad v_0 (ver Figura 3.6; obviaremos la dependencia de las magnitudes con la frecuencia). Supongamos también que un arco pequeño de ese anillo (el nódulo) está formado por gas con una profundidad óptica τ_n , a una temperatura T_n y expandiéndose a una velocidad v_n (*gas nodular*), en el caso más general. El ángulo sólido subtendido por el nódulo es $\delta\Omega$ mientras que el anillo completo subtiende un ángulo sólido Ω . El flujo procedente de esta estructura está emitido por volúmenes con velocidades distintas y tendremos dos contribuciones a diferentes frecuencias. Sea entonces un anillo homogéneo formado por dos componentes gaseosas distintas: una de ellas está compuesta por gas con una profundidad óptica τ_a , a una temperatura T_a y que se expande a una velocidad v_a (*gas anular*), mientras que la otra está formada por gas esférico con las mismas características que en el caso del nódulo. Finalmente, consideremos que los tres tipos de gases tienen la misma composición.

Asumiendo que la temperatura y la velocidad de expansión de los gases anular y nodular son iguales ($T_n = T_a$, $v_n = v_a$), también podemos asumir que son iguales sus funciones fuente ($S_n(T_n) = S_a(T_a)$). Por lo tanto, la relación existente entre las profundidades ópticas del gas nodular (τ_n), del esférico (τ_0) y del anular (τ_a) es la siguiente:

$$(I - S_n) e^{-\tau_n} + S_n + (I e^{-\tau_0} - S_n) (1 - e^{-\tau_a}) \frac{\Omega}{\delta\Omega} = e^{-\tau_0} (I - S_0) + S_0, \quad (3.60)$$

donde $S_i = S_i(T_i)$, con $i = 0, a, n$, son las funciones fuente de las tres componentes gaseosas consideradas. La derivación de la expresión anterior se puede encontrar en el Apéndice A.10.

La Ec. 3.60 es engañosa y requiere observarla cuidadosamente para darse cuenta de que, a pesar de ser una igualdad, representa una equivalencia aproximada entre la estructura real y el anillo homogéneo formado por las dos componentes gaseosas, incluso en el caso de tener gases ópticamente transparentes. Tanto las profundidades ópticas, como las funciones fuente y la intensidad de la radiación que incide desde las regiones traseras de la envoltura dependen de la frecuencia. El tener éxito en la determinación de una estructura equivalente a la que contiene al nódulo hubiera requerido encontrar un sistema tal que los gases esférico, anular y nodular emitieran y absorbieran según un perfil de línea gaussiano. Tomando los perfiles de línea de los gases esférico y anular como gaussianos (por ser estos gases a los que tenemos acceso a través del código), nos encontramos con que el determinado para el perfil del gas nodular *no es gaussiano* y puede llegar a tener una pequeña contribución a la velocidad del gas esférico (ver Figura 3.7). No obstante, la aproximación es relativamente buena y esta contribución no deseada no supera el 10 – 15 % de la producida a la velocidad del gas nodular tomando valores razonables de los parámetros.

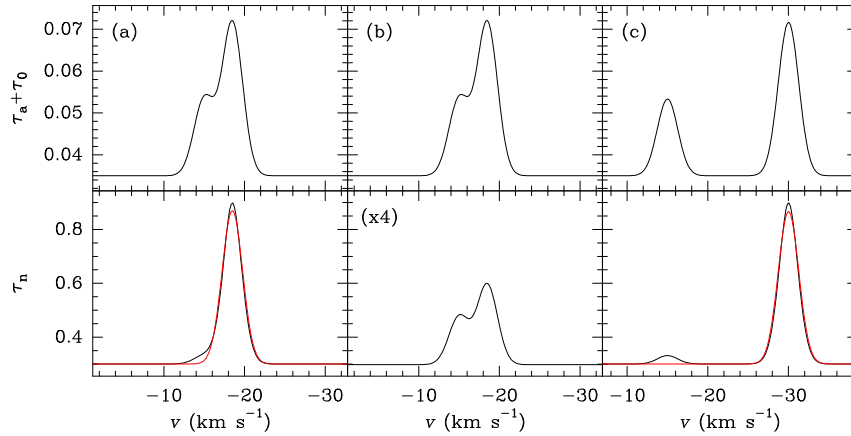


FIGURA 3.7.— Estimación de la emisión molecular de un nódulo a partir de los gases esférico y anular. Con el fin de ver una representación de los resultados obtenidos mediante la utilización de la Ec. 3.60, hemos considerado varios casos de anillo equivalente. (a) La gráfica superior de la columna representa la opacidad de una línea genérica centrada a 750 cm^{-1} (frecuencia de laboratorio) en el anillo equivalente al nódulo (formado por gas esférico y gas anular; ver texto). En el sistema inicial la componente esférica está compuesta por gas y polvo y tiene un desplazamiento Doppler de -15 km s^{-1} , siendo la composición de la componente anular similar a la esférica (aunque aumentando los valores de la función fuente y de las opacidades del gas y del polvo) pero con un desplazamiento en velocidades de -18.5 km s^{-1} . El espectro negro de la gráfica inferior muestra la opacidad de la línea obtenida mediante la aplicación de la Ec. 3.60. El espectro rojo es un ajuste gaussiano a la línea anterior realizado mediante el método de los mínimos cuadrados. En ambas gráficas hemos tomado la cantidad $\delta\Omega/\Omega = 0.1$. Se observa que la opacidad del gas nodular generada es muy similar a una gaussiana, existiendo una pequeña contribución a la velocidad del gas esférico. (b) Las gráficas superior e inferior representan lo mismo que las del caso (a) pero con $\delta\Omega/\Omega = 0.5$. La opacidad inferior ha sido multiplicada por un factor 4 para una mejor comparación. La importancia de la contribución a la velocidad del gas esférico es muy grande, indicando un muy pequeño grado de equivalencia entre el sistema con el nódulo y el sistema con el anillo. (c) Este caso es igual al caso (a) pero habiendo elegido un desplazamiento Doppler para el gas nodular (y el anular) de -30 km s^{-1} . El perfil de la opacidad correspondiente al gas nodular sigue sin ser gaussiano pero es muy parecido. La contribución a la velocidad del gas esférico es bastante pequeña con respecto a aquella con velocidad de -30 km s^{-1} y puede ser despreciada en primera aproximación.

En muchos casos esta contribución es menor del 1 % de la componente correspondiente al gas nodular.

Por lo tanto, se puede utilizar este resultado para introducir en el modelo desarrollado la presencia de uno o varios nódulos en cualquier punto de la CSE de manera aproximada.

3.3.15. Cálculo de errores

Hasta el momento hemos tratado de resolver el problema de transferencia de radiación en una estrella AGB (PPN) haciendo un modelo numérico que depende de una serie de parámetros determinables mediante la comparación de las simulaciones y los datos observacionales. Sin embargo, también es necesario estimar el error de estos parámetros y determinar la influencia que tienen en el resultado final.

Como veremos en el Capítulo 4, el procedimiento que hemos seguido en el ajuste de las líneas espectrales no incluye el tratamiento estadístico mediante la función χ^2 . Por el contrario, en el caso de las incertidumbres de los parámetros del modelo, sí hemos optado

por un método numérico. Dada una línea, pueden existir varios parámetros que afecten de modo similar el perfil sintético enmascarando sus efectos e impidiendo una determinación precisa de los valores que permiten un ajuste razonable. No obstante, podemos calcular el valor máximo (y mínimo) adoptado por cada parámetro considerándolo como una función de los demás y siguiendo el gradiente de esta función (o el vector opuesto al gradiente para buscar el mínimo). Para crear este tipo de funciones, es necesario imponer una restricción sobre el perfil sintético con respecto al observado. Esta restricción puede ser, por ejemplo, el fijar la función χ^2 como igual a un valor elegido o el forzar al perfil sintético a diferir del observado en menos de una cantidad. Este método es especialmente adecuado para el tratamiento de modelos dependientes de un gran número de parámetros, puesto que el tiempo de cálculo necesario para encontrar el máximo (mínimo) de las funciones propuestas es directamente proporcional al número de parámetros.

3.3.16. Código desarrollado

El código ha sido desarrollado en FORTRAN 90 bajo GNU/Linux⁶ y compilado con el compilador *gfortran*⁷. El programa completo está formado por 28 subrutinas de las que 15 componen su núcleo. Gracias a una interfaz en modo texto es posible modificar los parámetros de manera relativamente cómoda. El programa viene acompañado por varios archivos de datos que proporcionan las constantes espectroscópicas, los niveles vibracionales moleculares y la información sobre las transiciones moleculares. Se generan dos archivos de salida con la información del espectro sintético de la radiación emitida por el sistema y del detectado, respectivamente, estructurados en 5 columnas: la longitud de onda de la radiación en μm , la frecuencia en cm^{-1} , el flujo compuesto por el continuo y la emisión molecular en Jy, el flujo del continuo en Jy y la razón entre la columna 3 y la 4, es decir, el flujo normalizado. También existen otros archivos de salida generados al principio de la ejecución con información sobre el sistema: los perfiles de temperatura cinética, densidad y velocidad del gas, temperatura y densidad del polvo, la anchura de línea, la sección eficaz de absorción del polvo y las absorciones de cada línea individualmente en función de la distancia a la estrella. También se puede estudiar la contribución de cada una de las capas en las que se divide la envoltura al flujo emitido y obtener el flujo en un punto de la envoltura.

⁶Si bien hemos utilizado GNU/Linux para desarrollar el programa, es independiente de la plataforma por no depender de librerías externas, aunque sí depende ligeramente del compilador.

⁷<http://gcc.gnu.org/fortran/>

Capítulo 4

La zona de aceleración de la CSE de IRC+10216

Como ya hemos podido ver en la Sección 1.2, la estrella IRC+10216 es probablemente uno de los objetos AGB mejor estudiados, habiendo una extensa bibliografía al respecto. No obstante, a pesar de todos los esfuerzos invertidos, aún no se ha conseguido vislumbrar claramente qué es lo que ocurre en la zona de aceleración de la CSE. La falta de resolución angular y, en algunos casos, de sensibilidad, las dificultades existentes para la observación en ciertos rangos del espectro electromagnético, impiden que los estudios realizados hasta el momento nos permitan obtener información detallada de la zona de formación de polvo en IRC+10216.

La zona externa de la CSE ha sido ampliamente estudiada en la emisión de una gran cantidad de moléculas desde el descubrimiento de IRC+10216, gracias a que la atmósfera terrestre es muy transparente a la radiación con longitudes de onda centimétricas y milimétricas. Actualmente, un gran número de radiotelescopios permiten la recepción de señales de este tipo: el radiotelescopio de 30 m de Pico Veleta y el interferómetro de Plateau de Bure, ambos de IRAM, el telescopio de 100 m de Effelsberg del MPIfR, el GBT y el interferómetro VLA de NRAO entre otros. Pero, por desgracia, hay otros rangos como son el submilimétrico y el infrarrojo que todavía han sido poco explotados aunque se está trabajando en ello: los radiotelescopios APEX y CSO y los interferómetros SMA y el futuro ALMA, son algunos de los instrumentos que pueden o podrán observar radiación submilimétrica. Las observaciones infrarrojas desde tierra siempre han sido difíciles de realizar por la gran opacidad de la atmósfera a esta radiación a causa del agua y el CO₂, entre otras especies. Hay muy pocas ventanas lo suficientemente transparentes como para poder tomar datos fiables. Las observaciones realizadas en el rango del infrarrojo eran escasas antes del lanzamiento del satélite ISO, que hizo evidente la necesidad de explorar este rango del espectro electromagnético. ISO desveló esencialmente la riqueza de los espectros en el infrarrojo lejano. Afortunadamente, los resultados de ISO fueron espectaculares e impulsaron la Astrofísica infrarroja: el satélite Spitzer ya está funcionando mientras que Herschel será lanzado a mediados del 2009. Además, aprovechando que es posible observar en el infrarrojo medio desde tierra, han comenzado a funcionar (o lo harán en un futuro próximo) diversos instrumentos como el monocromador TEXES (prácticamente coexistente en el tiempo con ISO), los telescopios JCMT, IRTF y Gemini, y el observatorio estratosférico SOFIA, entre otros.

El estudio y la comprensión profunda de la zona de aceleración de las envolturas circunestelares es uno de los campos en los que se debe profundizar para conocer la evolución estelar y su impacto en el medio interestelar. Como ya expusimos en el Capítulo 1, las teorías de la evolución estelar aceptadas aseguran que la fase PN sigue a la AGB a través de la interfase PPN. Sin embargo, cómo se generan los vientos que expulsan la materia al ISM, cómo evolucionan, cómo cambia la estrella durante este proceso, qué materiales se crean

en el proceso, cómo cambia la geometría de la zona cercana a la estrella y a raíz de qué, son algunos de los procesos físicos que todavía necesitan más datos observacionales para poder obtener respuestas convincentes y poder desarrollar modelos teóricos sólidos. En este Capítulo, trataremos de contribuir a la resolución de algunos de estos problemas estudiando un espectro en el rango del infrarrojo medio de la estrella AGB prototípica IRC+10216. Las observaciones en este rango del espectro son muy útiles para estudiar las zonas más calientes de la envoltura, es decir, las más internas, evitando tener contribuciones del gas frío que se encuentra en las regiones más externas de la CSE. Estudiaremos, entre otras cosas, cómo es el campo de radiación en la envoltura interna, cuál es el papel que desempeña el polvo en la evolución de la envoltura, cómo puede ser la geometría de la CSE y cómo se comportan el acetileno y el cianuro de hidrógeno en un medio tan extremo como el que rodea a una estrella pulsante.

4.1. Observaciones

Las observaciones fueron realizadas por J. H. Lacy, M. J. Richter y colaboradores con el monocromador TEXES (*Texas Echelon-cross-Echelle Spectrograph*; Lacy et al., 2002) acoplado al telescopio de 3 m IRTF (*NASA Infrared Telescope Facility*), optimizado para el infrarrojo, el 12 de Diciembre del 2002. Durante las observaciones la fase de pulsación de la estrella en el infrarrojo era $\phi_{\text{IR}} \simeq 0.08$ (según Monnier et al., 1998). Se utilizó la red de difracción en escalón de alta resolución espectral del instrumento TEXES seleccionando el primer orden de difracción. En este modo, se alcanzó una cobertura espectral de unos $0.25 \mu\text{m}$ en una sola configuración, siendo necesarias 10 configuraciones para cubrir el rango espectral entre 11.6 y $13.9 \mu\text{m}$.

A estas longitudes de onda, la radiación es difundida en cada orden de difracción según un ángulo mayor que el aceptado por el receptor lo que implica la existencia de espacios vacíos en el espectro entre órdenes adyacentes. Estos espacios aumentan en tamaño con la longitud de onda debido a que también lo hace la anchura de cada orden. Las líneas telúricas crecen en intensidad y frecuencia hacia los $13.9 \mu\text{m}$. En las zonas en las que la atmósfera es prácticamente opaca (transmisión $< 5\%$) los datos fueron descartados, apareciendo espacios adicionales en el espectro.

Al usar el primer orden de dispersión, la rendija de entrada del monocromador TEXES debe ser muy pequeña para prevenir solapamiento de órdenes. Durante estas observaciones la longitud de la rendija fue fijada a $2''.2$. Para eliminar el efecto atmosférico, se sacó a IRC+10216 fuera de la rendija regularmente. Las condiciones atmosféricas fueron lo suficientemente buenas como para pensar que este hecho no introdujo ningún error sistemático significativo en las observaciones.

Los datos fueron reducidos mediante el uso de los programas estándar del instrumento TEXES (Lacy et al., 2002). Estos procesos corrigen las distorsiones ópticas, combinan las observaciones de la fuente y fuera de ella, eliminan el efecto de los rayos cósmicos, regiones oscuras de los espectros que pueden ser debidas a polvo o píxeles defectuosos en la CCD, corrige los efectos de la absorción telúrica del espectro, establece una escala de frecuencias usando líneas atmosféricas y genera el espectro final. Este espectro fue normalizado antes del análisis utilizando un polinomio de grado 4 para detectar la línea de base, pues el continuo detectado no era representativo de la fuente. Típicamente, las mejores correcciones telúricas se obtienen a partir de observaciones de asteroides. Sin embargo, IRC+10216 es mucho más brillante que los asteroides disponibles por lo que limitaríamos la relación señal/ruido al utilizar este procedimiento. Comúnmente, se utiliza el espectro diferencia entre la atmósfera y un cuerpo negro a una temperatura característica para eliminar la contribución telúrica. En un caso ideal en el que las temperaturas de la atmósfera, el telescopio y el cuerpo negro fueran uniformes, el espectro diferencia indicaría la absorción del cielo. Desde el punto de vista experimental, este procedimiento de corrección atmosférica funciona bastante bien salvo para el vapor de agua atmosférico, ya que puede cambiar en escalas

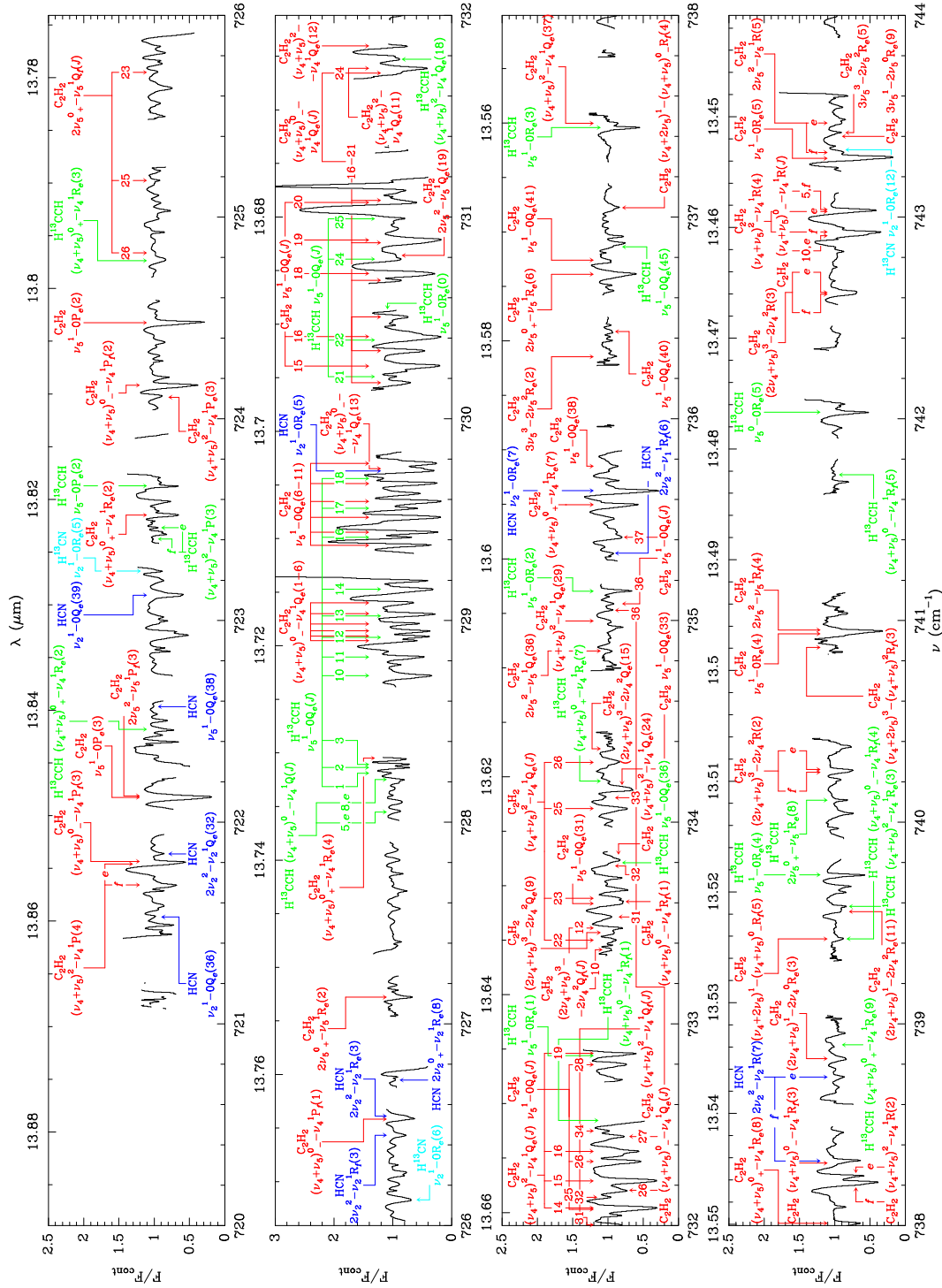


FIGURA 4.1.— Espectro observado de IRC+10216 en el rango 720-744 cm^{-1} con resolución de $\approx 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ ($\approx 3 - 4 \text{ km s}^{-1}$). En la Figura se indican las transiciones más importantes de C_2H_2 (rojo), HCN (azul), H^{13}CCH (verde) y H^{13}CN (azul claro). La sensibilidad es lo suficientemente alta como para detectar especies moleculares con abundancias relativas al H_2 tan pequeñas como $10^{-8} - 10^{-7}$. Los huecos se producen entre órdenes de la red de dispersión y en regiones de muy alta opacidad atmosférica. Muchas de las líneas no indicadas permanecen sin identificar todavía mientras que otras sí lo han sido pero no se han indicado por cuestión de espacio.

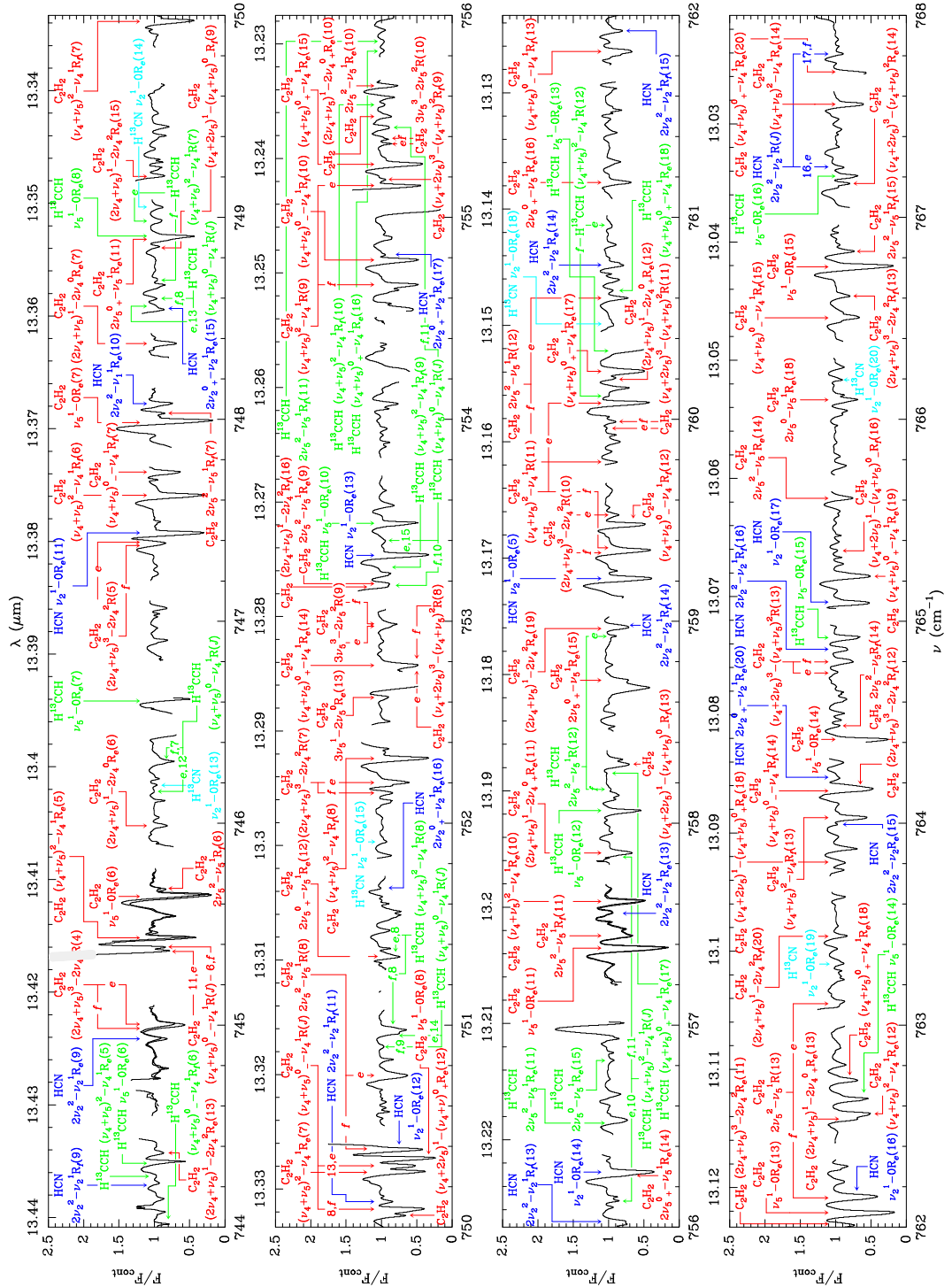


FIGURA 4.2.– Espectro observado de IRC+10216 en el intervalo 744-768 cm^{-1} con resolución de $\approx 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ ($\approx 3 - 4 \text{ km s}^{-1}$). En la Figura se indican las transiciones más importantes de C_2H_2 (rojo), HCN (azul), H^{13}CCH (verde) y H^{13}CN (azul claro).

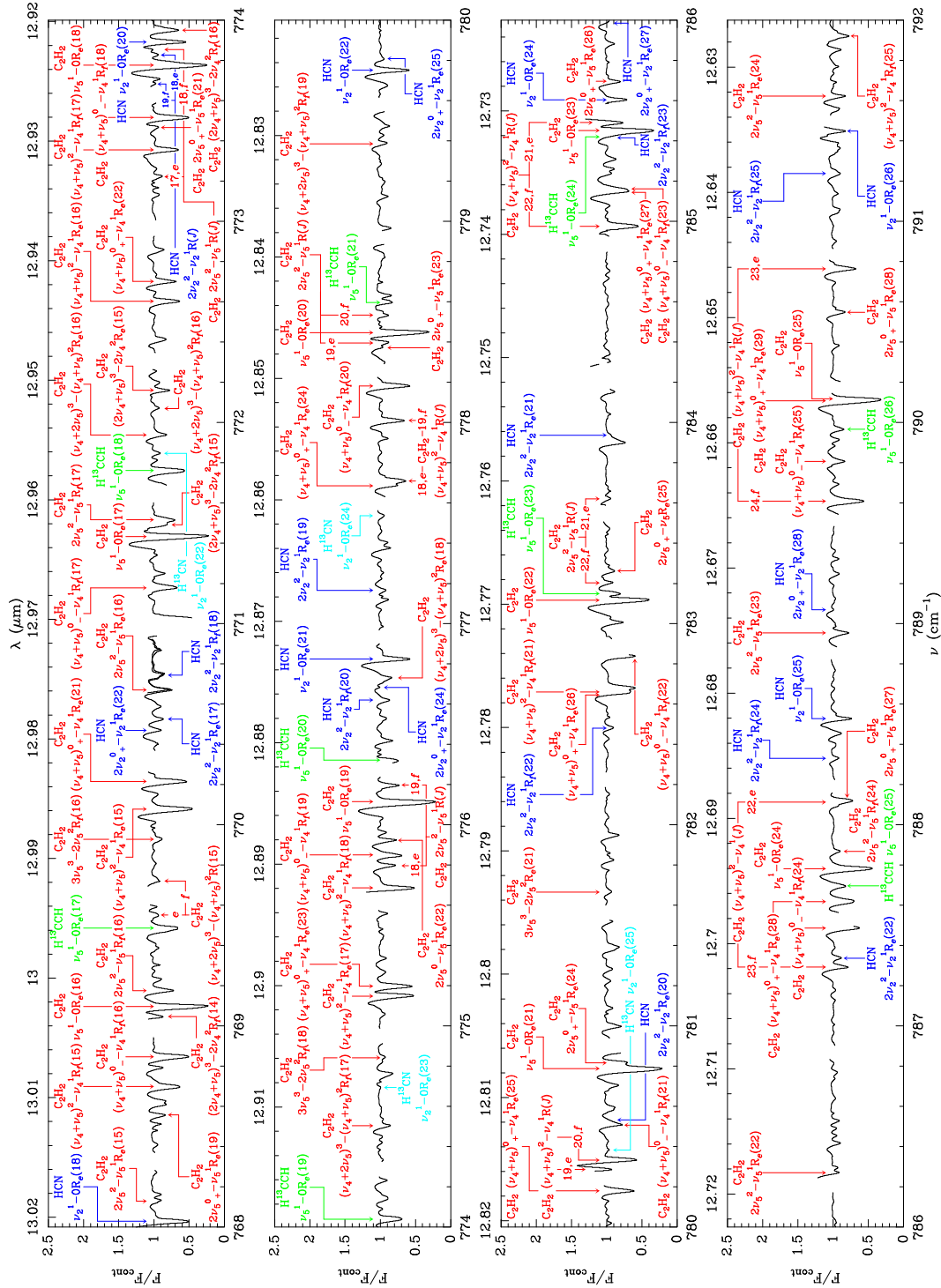


FIGURA 4.3.— Espectro observado de IRC+10216 en el intervalo 768-792 cm^{-1} con resolución de $\approx 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ ($\approx 3 - 4 \text{ km s}^{-1}$). En la Figura se indican las transiciones más importantes de C_2H_2 (rojo), HCN (azul), H^{13}CCH (verde) y H^{13}CN (azul claro).

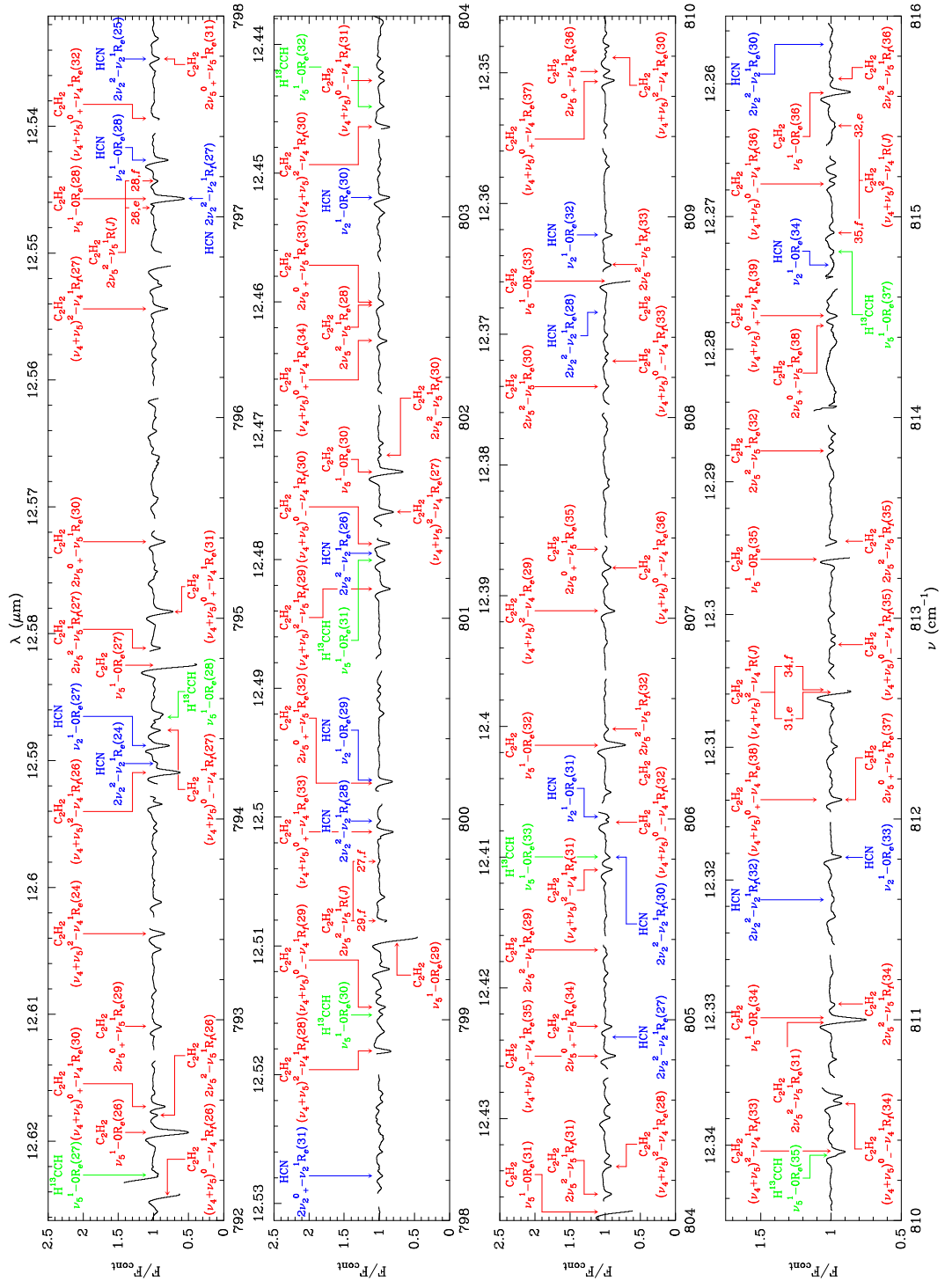


FIGURA 4.4.– Espectro observado de IRC+10216 en el intervalo 792-816 cm^{-1} con resolución de $\approx 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ ($\approx 3 - 4 \text{ km s}^{-1}$). En la Figura se indican las transiciones más importantes de C_2H_2 (rojo), HCN (azul), H^{13}CCH (verde) y H^{13}CN (azul claro). La escala del eje y ha sido cambiada más allá de 810 cm^{-1} para mostrar las líneas moleculares más claramente.

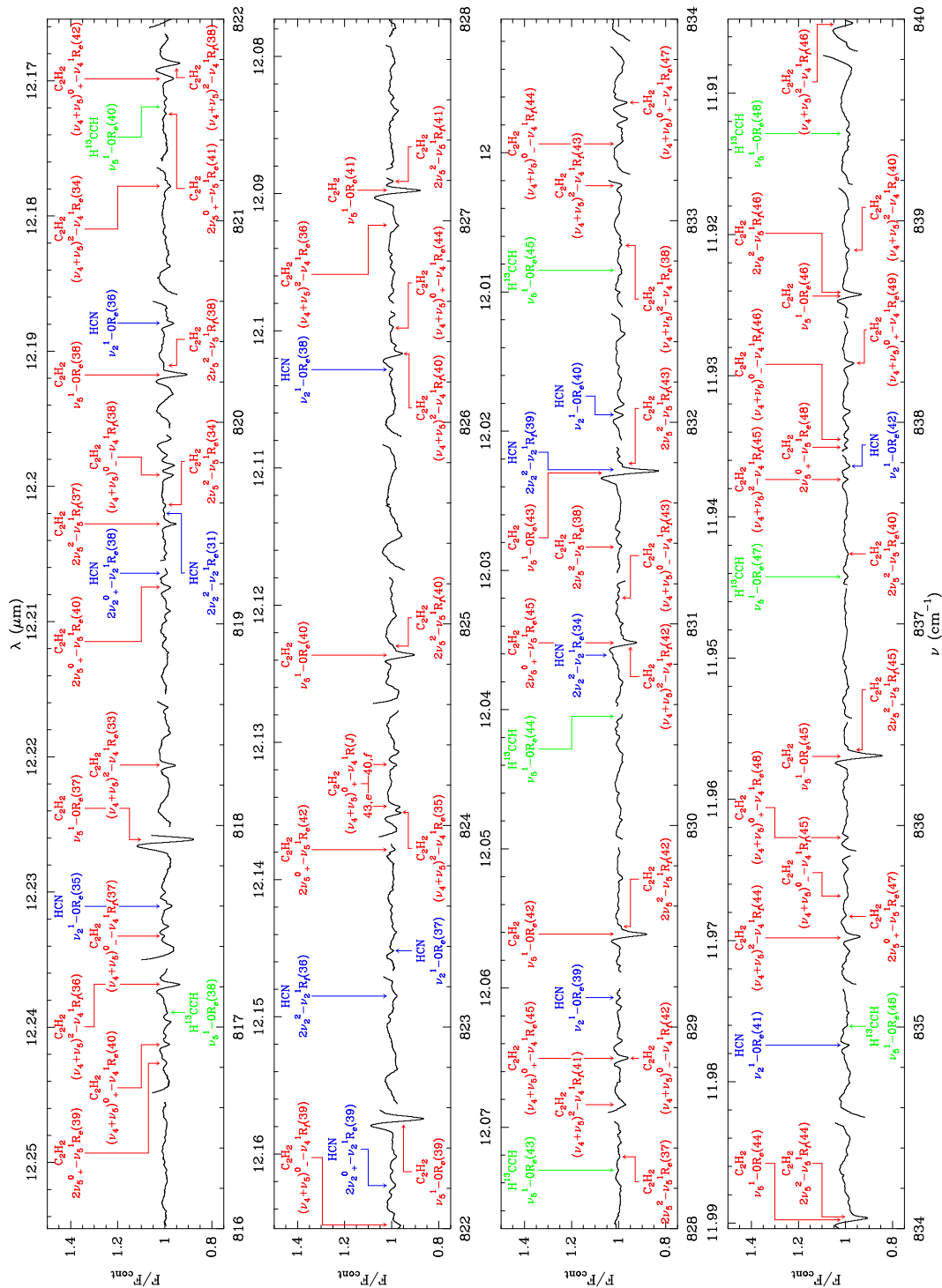


FIGURA 4.5.— Espectro observado de IRC+10216 en el intervalo 816-840 cm⁻¹ con resolución de $\approx 10^{-2}$ cm⁻¹ ($\approx 3 - 4$ km s⁻¹). En la Figura se indican las transiciones más importantes de C₂H₂ (rojo), HCN (azul), H¹³CCH (verde) y H¹³CN (azul claro). La escala del eje y ha sido cambiada con respecto a las Figuras 4.1-4.3 para mostrar las líneas moleculares más claramente.

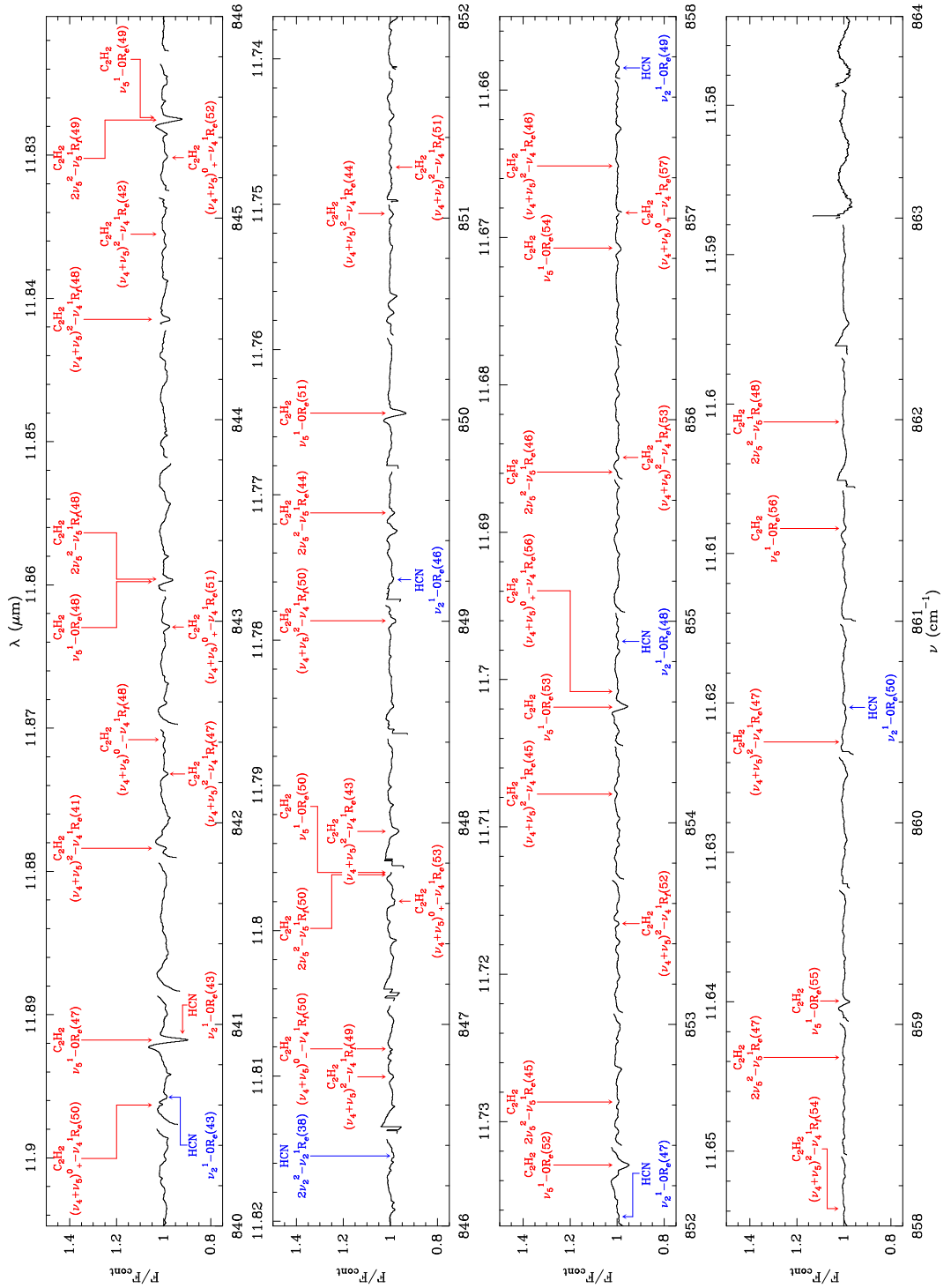


FIGURA 4.6.— Espectro observado de IRC+10216 en el intervalo 840-864 cm^{-1} con resolución de $\simeq 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ ($\simeq 3 - 4 \text{ km s}^{-1}$). En la Figura se indican las transiciones más importantes de C_2H_2 (rojo), HCN (azul), H^{13}CCH (verde) y H^{13}CN (azul claro). La escala del eje y ha sido cambiada con respecto a las Figuras 4.1-4.3 para mostrar las líneas moleculares más claramente.

TABLA 4.1. – Líneas del C_2H_2 , $H^{13}CCH$, HCN y $H^{13}CN$ identificadas y modeladas

Banda roviibracional				# Líneas detectadas		Banda roviibracional				# Líneas detectadas		
Nivel sup.	Nivel inf.	Rama	C ₂ H ₂	H ¹³ CCH		Nivel sup.	Nivel inf.	Rama	C ₂ H ₂	H ¹³ CCH		
$\nu_5(\pi_u)$ $\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+)$ $\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-)$	G.S.(σ_g^+) $\nu_4(\pi_g)$ $\nu_4(\pi_g)$	R_e	50 (30)	39 (26)		$2\nu_5(\delta_g)$	$\nu_5(\pi_u)$	R_f	40 (24)	2 (0)		
		Q_e	21 (0)	17 (0)				P_f	1 (0)	0 (0)		
		P_e	2 (0)	1 (0)		$2\nu_4 + \nu_5(\pi_u)$	$2\nu_4(\sigma_g^+)$	R_e	7 (0)	0 (0)		
		R_e	46 (15)	11 (9)		$2\nu_4 + \nu_5(\pi_u)$	$2\nu_4(\delta_g)$	R_e	4 (0)	0 (0)		
		R_f	42 (25)	9 (4)				R_f	2 (0)	0 (0)		
		Q_e	20 (0)	2 (0)		$2\nu_4 + \nu_5(\phi_u)$	$2\nu_4(\delta_g)$	R_e	7 (0)	0 (0)		
		P_f	3 (0)	0 (0)				Q_e	2 (0)	0 (0)		
		R_e	37 (25)	9 (7)				R_f	11 (0)	0 (0)		
		Q_f	3 (0)	0 (0)				Q_f	2 (0)	0 (0)		
		P_e	2 (0)	1 (0)		$\nu_4 + 2\nu_5(\pi_g)$	$\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+)$	R_e	2 (0)	0 (0)		
$2\nu_5(\sigma_g^+)$ $2\nu_5(\delta_g)$	$\nu_5(\pi_u)$ $\nu_5(\pi_u)$	R_f	44 (27)	6 (5)		$\nu_4 + 2\nu_5(\pi_g)$	$\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-)$	R_f	5 (0)	0 (0)		
		Q_e	13 (0)	1 (0)		$\nu_4 + 2\nu_5(\phi_g)$	$\nu_4 + \nu_5(\delta_u)$	R_e	7 (0)	0 (0)		
		P_f	1 (0)	1 (0)				R_f	8 (0)	0 (0)		
		R_e	34 (18)	2 (2)		$3\nu_5(\pi_u)$	$2\nu_5(\sigma_g^+)$	R_e	2 (0)	0 (0)		
		Q_f	3 (0)	0 (0)		$3\nu_5(\phi_u)$	$2\nu_5(\delta_g)$	R_e	5 (0)	0 (0)		
		R_e	31 (16)	5 (5)				R_e	5 (0)	0 (0)		
		Q_e	2 (0)	0 (0)				R_f	4 (0)	0 (0)		
		Nivel sup.	Nivel inf.	Rama	HCN	H ¹³ CN	Nivel sup.	Nivel inf.	Rama	HCN	H ¹³ CN	
		$\nu_2(\pi)$	G.S.(σ^+)	R_e	37 (19)	7 (5)	$2\nu_2(\delta)$	$\nu_2(\pi)$	R_e	23 (14)	0 (0)	
Q_e	3 (0)			0 (0)	R_f	22 (17)			0 (0)			
$2\nu_2(\sigma^+)$	$\nu_2(\pi)$	R_e	11 (10)	0 (0)			Q_e	1 (0)	0 (0)			

Los números indican las líneas detectadas (entre paréntesis las modeladas). Muchas de las líneas detectadas en cada banda están contaminadas por solapamientos con otras líneas del sistema, con líneas atmosféricas o por el efecto de las fronteras de los órdenes de la red de difracción. Las líneas detectadas que incluyen niveles roviibracionales con J y energía elevados serán estudiadas más adelante. Aquellas que han sido elegidas para ser ajustadas son las líneas de mayor calidad de cada banda. La notación espectroscópica se puede ver en el Capítulo 2.

de tiempo muy cortas y desde una línea de mirada a otra próxima.

El espectro observado cubre el rango de longitudes de onda entre 720 y 864 cm^{-1} . Teniendo en cuenta las moléculas detectadas en esta fuente (Keady & Ridgway, 1993; Cernicharo et al., 2000), existen varios candidatos que pueden contribuir a las líneas observadas: C_2H_2 , HCN, SiS y algunos haluros metálicos, incluyendo sus isotopómeros. Todos ellos tienen bandas vibracionales a las longitudes de onda observadas (ver Figuras 4.1–4.6 y Sección 2.2). A pesar de que hemos detectado líneas de SiS y otros compuestos hemos decidido centrarnos en las líneas de C_2H_2 y HCN (e isotopómeros) y dejar las demás especies para más adelante (ver Tabla 4.1).

El espectro ha sido corregido del movimiento de la fuente identificando y modelando la mayor parte de las líneas de las ramas $\nu_5\text{R}_e$ del C_2H_2 y $\nu_2\text{R}_e$ del HCN encontradas en el espectro y calculando el desplazamiento medio existente entre las frecuencias observadas y las obtenidas en el laboratorio (Rothman et al., 2003). Este desplazamiento es $\simeq 45 \text{ km s}^{-1}$. Sin embargo, a causa de pequeñas incertidumbres procedentes del proceso observacional, ha sido necesaria una corrección extra de $0.25 - 2.5 \text{ km s}^{-1}$ (hacia el rojo o hacia el azul) en los datos de ciertas configuraciones. Además, hemos tenido que corregir la frecuencia central de algunas bandas de C_2H_2 y HCN tomadas de Base de Datos HITRAN desplazándolas $0.5 - 1.5 \text{ km s}^{-1}$ hacia el azul, lo que es consistente con la incertidumbre de las medidas de laboratorio.

Los datos tomados con los instrumentos TEXES/IRTF proporcionan únicamente información sobre líneas moleculares. No obstante, es necesario tener observaciones del continuo para poder modelar completamente la CSE de IRC+10216. Es por ello que hemos utilizado las observaciones del satélite ISO/SWS realizadas el 31 de Mayo de 1996 (UT), que corresponde a una fase de pulsación en el infrarrojo de $\phi_{\text{IR}} \simeq 0.34$. Las consecuencias de la utilización simultánea de observaciones con distinta fase serán comentadas en la Sección 4.7.

4.2. Condiciones iniciales y procedimiento

Utilizando la información obtenida de trabajos previos sobre IRC+10216 (ver Sección 1.2 y Figura 4.7), hemos adoptado en nuestros modelos una temperatura estelar de 2330 K, una distancia de 180 pc, un radio angular para la estrella de $0''.019$ (que se corresponde con un radio lineal de $735 R_{\odot}$) y un ritmo de pérdida de masa de $2.1 \times 10^{-5} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$. Todos estos parámetros se han mantenido fijos en nuestras simulaciones de IRC+10216.

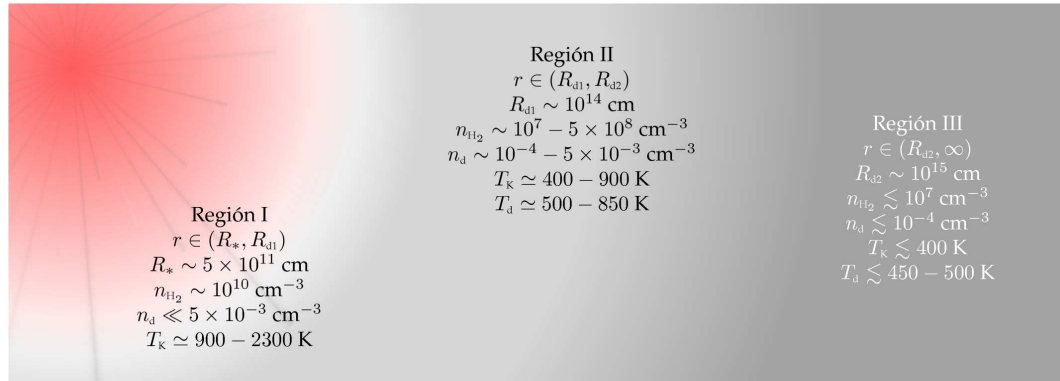


FIGURA 4.7.— Condiciones físicas en la CSE de IRC+10216. La CSE de IRC+10216 puede ser dividida en tres regiones distintas con características físicas diferentes. La Región I es la más estrecha, caliente y densa. La cantidad de polvo existente en ella se supone pequeña. La Región II es una zona también densa, templada y con bastante polvo. La componente formada por el polvo de la CSE comienza en su frontera con la Región I. Como veremos, su contribución al continuo es la mayor de las tres. La Región III es el resto de la CSE: es una región tenue, fría y con gran cantidad de polvo.

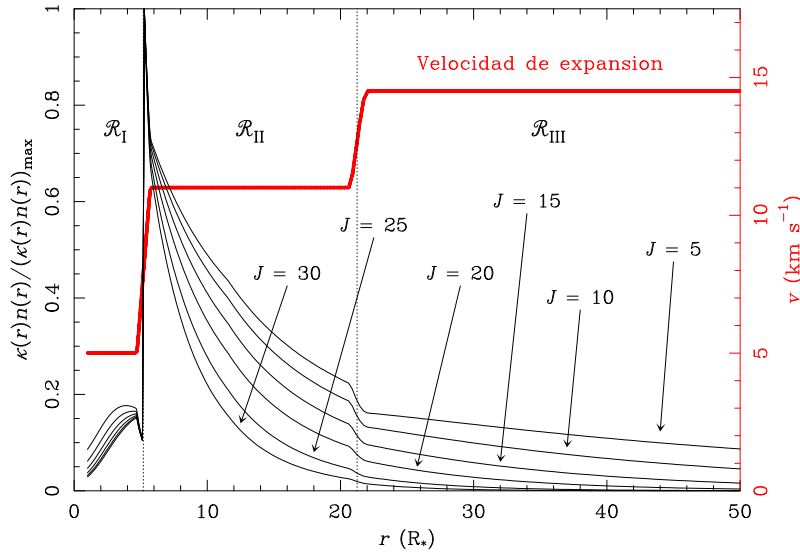


FIGURA 4.8.— Profundidad óptica por unidad de longitud para varias líneas de la rama $\nu_5(\pi_u)R_e$ del C_2H_2 . La opacidad de las líneas que involucran niveles rovibracionales con J pequeño es todavía importante a $50 R_*$. Sin embargo, aquellas que se producen entre niveles rovibracionales con valores grandes de J ($J > 20$) se forman principalmente en las regiones internas e intermedias (Regiones I y II). Por tanto, podemos obtener información sobre la envoltura externa (Región III) ajustando líneas con J pequeño mientras que aquellas con J grande son sensibles a las condiciones físicas y químicas cerca de la estrella. Elijiendo la línea adecuada podemos mejorar la precisión en la determinación de los parámetros en una región en particular (ver Tabla 4.6). La línea roja gruesa representa el campo de velocidades. El gran incremento sufrido por la opacidad a $\simeq 5 R_*$ se corresponde con el cambio en la abundancia de acetileno en la Región I que hemos encontrado en este trabajo.

El primer paso del procedimiento a seguir consiste en hallar los valores de los parámetros relativos al polvo que hacen que el continuo generado por el modelo ajuste lo mejor posible los datos observacionales tomados con el instrumento ISO/SWS. De este modo podemos estimar el comportamiento del polvo en cada una de las capas en las que hemos dividido la envoltura. Para ello, uno de los puntos más importantes es la determinación de la extensión de la CSE, R_{ext} . El valor de este parámetro debe ser tal que una variación suya no perturbe significativamente el espectro sintético. Aunque la envoltura puede extenderse hasta más de $1000 R_*$, el polvo que se encuentra en la parte más externa de la CSE no contribuye notoriamente al flujo del continuo en el infrarrojo medio. Una envoltura con un radio máximo de $600 R_*$ dividida en 300 capas es suficiente como para tener un buen ajuste del continuo. En la Sección siguiente expondremos el proceso de ajuste del continuo con toda la información relevante.

Una vez obtenidos los mejores valores para los parámetros relativos a la componente del polvo de la CSE, es posible iniciar el proceso de ajuste de las líneas moleculares. Las temperaturas vibracionales y rotacionales decrecen tan rápido que sólo la emisión y la absorción de los niveles rotacionales con una energía pequeña en el estado vibracional fundamental del C_2H_2 y HCN pueden estar afectados por la elección del radio externo en nuestros modelos (p.e., a $100 R_*$ la temperatura cinética es $\simeq 85$ K y el nivel más poblado del C_2H_2 es $J \simeq 4 - 5$, ver Figura 4.8). El radio externo de la CSE para el ajuste de líneas ha sido fijado en $300 R_*$ ya que no se observa modificación significativa alguna en el perfil de las líneas considerando la región $300 - 600 R_*$. Un total de 100 capas han sido utilizadas en el modelado.

La absorción a velocidades terminales está principalmente producida por el gas en la

Región III para líneas con valores pequeños de J . La absorción de las líneas ópticamente transparentes se produce esencialmente en la Región II, relacionada con el rango en velocidades en los perfiles $(-10, 10) \text{ km s}^{-1}$, encontrándose el máximo de absorción a velocidades de entre -8 y -10 km s^{-1} . El efecto de la región más interna de la CSE (Región I) y el hecho de que el continuo creado por el polvo se forma en su mayor parte fuera de esta zona, sobre las líneas con J pequeño queda atenuado en las líneas observadas porque el radio angular de estas regiones es pequeño en comparación con el del resto de la envoltura y está intensamente diluido en la PSF del telescopio. La temperatura cinética y la densidad en la Región I son suficientemente grandes como para asegurar ETL en toda la CSE para niveles rotacionales con $J \leq 20$ en los estados vibracionales con energías menores o iguales que $2\nu_5$ para el C_2H_2 y $2\nu_2$ para HCN. La validez de esta suposición ha sido testada en nuestros modelos y es aceptable. Sin embargo, a pesar de que los niveles rovibracionales muy energéticos puedan no cumplir la condición de ETL, están bastante poblados en la Región I permitiéndonos la derivación de parámetros físicos para las zonas más cercanas a la estrella. En consecuencia, la sensibilidad de las líneas observadas a las condiciones físicas del gas y la gran variación de estos parámetros a lo largo de la envoltura, limitan la resolución radial que podemos alcanzar para los perfiles de abundancias moleculares aunque nos permiten una caracterización bastante profunda de la CSE.

Como muchas líneas observadas están modificadas por una gran cantidad de pequeñas irregularidades, efectos telúricos y solapamientos con otras líneas, los ajustes derivados por minimización de la función χ^2 podrían ser peores que los obtenidos. Por otro lado, el modelo depende de muchos parámetros y minimizar la función χ^2 para todas las líneas seleccionadas es un problema totalmente intratable, por la gran cantidad de tiempo de integración necesario para los cálculos. Es posible demostrar que ajustar las líneas por inspección visual es un método suficientemente preciso disminuyendo el número de parámetros como una aproximación. En el cálculo de errores (ver Tabla 4.6) tomaremos la incertidumbre del espectro de un 10% para considerar la acumulación de errores instrumentales y de calibración, a pesar de que el error estimado durante la reducción de los datos observaciones fue significativamente menor.

4.3. La emisión del continuo

Las propiedades del polvo afectan considerablemente a la excitación molecular debido al acoplamiento entre el polvo y el gas. Todas las líneas creadas en la envoltura interna de la CSE presentan perfiles de tipo P-Cygni, en particular las líneas del C_2H_2 y del HCN (ver Figuras 4.1–4.6). El perfil de una línea depende de parámetros del polvo como su temperatura, su composición, el tamaño de los granos y las secciones eficaces de absorción y dispersión, tanto en la zona en la que se forma la línea como más allá. Esto es debido a que la radiación que interactúa con la transición que produce la línea es también continuamente procesada por el polvo. El polvo tiende a mezclar radiación a distintas frecuencias y de este modo suaviza la modificación en el continuo producida por la transición.

En este trabajo, hemos ajustado el continuo de IRC+10216 observado con ISO/SWS, fijando los parámetros del polvo con la ayuda de los valores mostrados en la Sección 1.2. Las observaciones de ISO usadas para este propósito son las utilizadas por Cernicharo et al. (1999). Asumimos que la diferencia entre las fases estelares de las observaciones con ISO/SWS y con IRTF/TEXES, no introduce un efecto importante en el polvo y las propiedades moleculares, y la T_d derivada de las observaciones de ISO/SWS es similar a aquella existente en el momento de las observaciones con ISO/TEXES. Hablaremos de la aplicabilidad de esta hipótesis en la Sección 4.1.

Hemos ajustado el continuo entre 7 y $27 \mu\text{m}$. Hacer un ajuste a los datos de ISO/SWS a longitudes de onda menores no es apropiado puesto que la dispersión de la radiación por los granos de polvo puede ser importante y el modelo desarrollado no incluye este efecto actualmente. La contribución de la estrella central al continuo observado es bastante

pequeña, con un valor máximo de 1075 Jy a $5.31 \mu\text{m}$ (frente a un flujo total a esa longitud de onda de $\simeq 15000$ Jy) mientras que la emisión a $10 \mu\text{m}$ es $\simeq 1.73$ veces menor. Es por ello que una pequeña modificación en la temperatura estelar no afecta significativamente al flujo emergente de la fuente en nuestro modelo. Sin embargo, hay que hacer notar que un cambio importante en la temperatura estelar en el sistema real podría modificar las condiciones físicas y químicas de la CSE y, por lo tanto, del flujo emergente (Monnier et al., 1998). En cualquier caso, parece obvio que la emisión del infrarrojo medio y lejano de IRC+10216 procede principalmente de la componente de polvo de la envoltura.

A partir de nuestro análisis, obtenemos que las zonas de formación de polvo interna y externa están situadas a $5.2^{+0.6}_{-0.5}$ y $21 \pm 3 R_*$ ($0''.1$ y $0''.4$), respectivamente (ver Figura 4.8, Tabla 4.6, y Sección 4.7). R_{d1} se deriva fácilmente del ajuste del continuo pero R_{d2} puede ser determinado con mayor precisión ajustando varias líneas moleculares, ya que el continuo no permite estudiar regiones para las que se requiera mucha resolución angular, como es el caso de R_{d2} . Por otra parte, estudiando cómo afecta un cambio en la densidad de polvo, n_d , en R_{d2} al continuo observado, obtenemos resultados imprecisos porque la variación de la densidad del polvo en esta capa afecta muy ligeramente al continuo.

La profundidad óptica calculada con nuestro modelo a $11 \mu\text{m}$ es de 0.7, similar a la propuesta por Monnier et al. (2000a), $\tau(\lambda = 11.15 \mu\text{m}) = 0.66$, y mayor que el valor derivado por Ivezić & Elitzur (1996), $\tau(\lambda = 10 \mu\text{m}) \simeq 0.32 - 0.40$. Por otro lado, la temperatura de la zona interna de formación de polvo, T_{d1} , obtenida en este trabajo es 850 ± 25 K (ver Sección 4.7 y Tabla 4.6 para una discusión en torno a los errores), menor que las sugeridas por Ridgway & Keady (1988) ($T_{d1} = 1040 \pm 100$ K) y Groenewegen (1997) ($T_{d1} = 1075 \pm 50$ K), similar a Monnier et al. (2000a) ($T_{d1} = 860$ K) y mayor que Ivezić & Elitzur (1996) ($T_{d1} = 750 \pm 50$ K). El exponente de la ley que sigue T_d resulta ser 0.39, bastante parecido al propuesto por Keady et al. (1988).

La composición del polvo que produce los mejores ajustes al continuo es de un 95% de carbono amorfo y un 5% de carburo de silicio. Una modificación en la proporción de SiC cambia la razón del flujo a $11 \mu\text{m}$ con respecto al resto de continuo. Pero este cambio en la composición puede ser balanceado modificando la profundidad óptica del polvo y su temperatura en R_{d1} . Para ajustar el continuo completo es necesario utilizar porcentajes más realistas, introducir otros materiales para tratar en el ajuste bandas como la que se encuentra a $30 \mu\text{m}$ y ampliar el ajuste a longitudes de onda mayores, región que no hemos tenido en cuenta por no considerar buena la calidad de los datos de ISO/LWS (Swinyard et al., 1998).

Teniendo en cuenta los diferentes periodos de observación y el rango de longitudes de onda cubierto en los dos conjuntos de datos considerados (ISO/SWS y IRTF/TEXES), consideramos que T_d y la opacidad en R_{d1} que hemos derivado son representativos de las condiciones físicas de IRC+10216.

4.4. Modelado de acetileno, C_2H_2

Con el fin de obtener la abundancia de acetileno y los parámetros físicos de la CSE, hemos seleccionado varios grupos de líneas de acetileno que son sensibles a los distintos parámetros del modelo (ver Tabla 4.1 y Figura 4.8). Con el perfil de velocidad asumido, la mayor parte de las líneas observadas y los perfiles de línea calculados están en buen acuerdo (ver Figura 4.9). La abundancia de C_2H_2 y las condiciones físicas obtenidas con los ajustes están descritos en las siguientes subsecciones.

4.4.1. Perfil de velocidades

El modelado simultáneo de distintas transiciones rovibracionales de la misma banda requiere un campo de velocidad de expansión con tres regiones distintas (Keady et al., 1988). Como se puede ver en la Figura 4.8, las líneas con una energía grande se forman más cer-

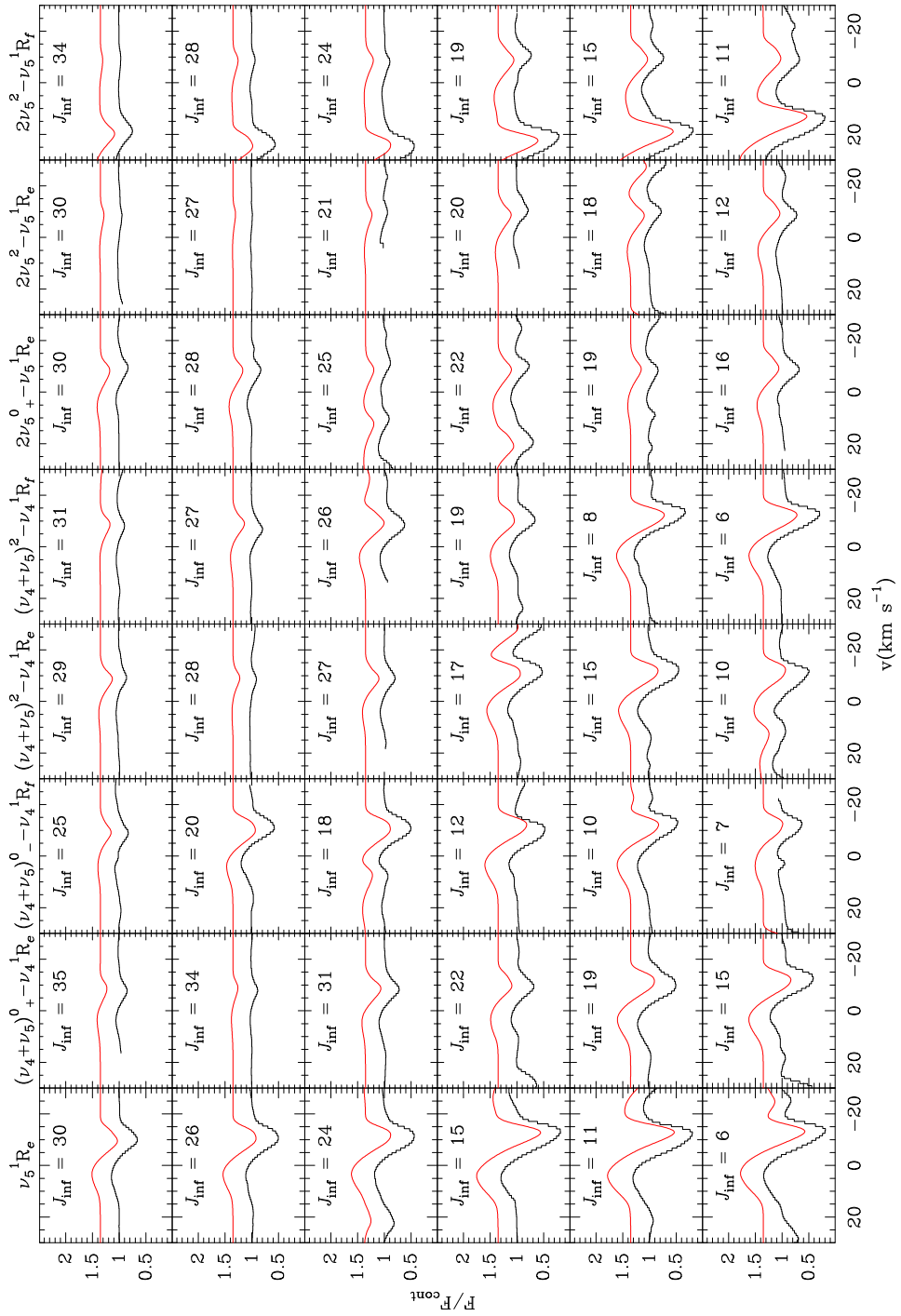


FIGURA 4.9.– Ajustes de las líneas seleccionadas de C_2H_2 . Los histogramas negros corresponden a las líneas observadas mientras que las curvas rojas son los resultados del modelo. Los datos observacionales han sido corregidos de posibles desviaciones en frecuencias debido a la toma de datos añadiendo o eliminando la distancia media entre las frecuencias en reposo observadas correspondientes a las líneas de la banda ν_5 –G.S. R_e y las mismas determinadas en laboratorio. Las discrepancias existentes son pequeñas y se pueden asumir como solapamientos con otras líneas y/o errores de observación. La notación espectroscópica se puede consultar en el Capítulo 2.

ca de la fotosfera estelar. Consecuentemente, el efecto de la expansión en el perfil de línea varía con J . En muchos casos, una variación en la velocidad de alguna de estas regiones modifica el perfil muy claramente. Por ejemplo, las velocidades del gas en las Regiones II y III controlan la posición del mínimo de intensidad. Así, las líneas que se forman más cerca de la fotosfera tienen la mayor parte de la absorción a velocidades menores que aquellas que lo hacen a distancias mayores. Por otro lado, el modelo es muy insensible a variaciones en la anchura de las capas donde se produce la aceleración (ver Sección 4.7). El efecto que la anchura térmica de la emisión molecular tiene sobre las líneas es muy similar al ensanchamiento Doppler producido por la aceleración del gas. La pequeña extensión de la región más interna de la envoltura y la pequeña resolución angular de nuestros datos impide una determinación más precisa de las condiciones físicas y químicas en la Región I. El mejor ajuste a las líneas se logra con el siguiente campo de velocidades (ver Figura 4.8):

$$v_e(r) = \begin{cases} 5, & 1 \leq r/R_* < 4.7 \\ 5 - 11^*, & 4.7 \leq r/R_* < 5.7 \\ 11, & 5.7 \leq r/R_* < 20.75 \\ 11 - 14.5^*, & 20.75 \leq r/R_* < 21.75 \\ 14.5, & 21.75 \leq r/R_* \end{cases} \quad (4.1)$$

donde * indica la existencia de un *gradiente de velocidad constante*, dv_e/dr , entre los radios interno y externo de la zona correspondiente.

4.4.2. Anchura de línea

Cuando se incluye la microturbulencia en los cálculos, la emisión procedente de la Región I se ensancha en frecuencias y la intensidad de las líneas alcanza su máximo a mayores velocidades (hacia frecuencias menores), comparado con los ajustes sin microturbulencia. Desafortunadamente, los ajustes de líneas en las que intervienen niveles rovibracionales de J intermedia y pequeña son relativamente insensibles a los parámetros Δv_1 y ℓ . Un cambio significativo en los perfiles ajustados requiere valores poco realistas para estos parámetros. Valores razonables para ellos son $\Delta v_1 = 5 \text{ km s}^{-1}$ y $\ell = 1.5 R_*$. Para la longitud característica, este valor es compatible con los fenómenos físicos que se producen cerca de la fotosfera, es decir, una pulsación moderada de la estrella central y la posible aparición de ondas de sonido (Bowen, 1988; Pijpers & Hearn, 1989a; Pijpers & Habing, 1989b). Sin embargo, los ajustes obtenidos con estos parámetros no son mucho más precisos que los calculados sin microturbulencia. Sólo cuando elegimos $\Delta v_1 = 30 \text{ km s}^{-1}$ y $\ell = 1.5 R_*$, los resultados del modelo reproducen mejor el ala roja de la componente en emisión del perfil P-Cygni para una gran cantidad de líneas (ver Figura 4.10). Las modificaciones producidas en los ajustes al incluir dicha velocidad de microturbulencia parecen aumentar la calidad de los perfiles sintéticos aunque, tanto los generados con $\Delta v_1 = 5 \text{ km s}^{-1}$ como con $\Delta v_1 = 30 \text{ km s}^{-1}$ están dentro de la precisión supuesta para las observaciones ($\simeq 10\%$). Discutiremos esto en la Sección 4.7.

4.4.3. Temperatura cinética, T_K

Los niveles de C_2H_2 con una energía pequeña o intermedia están muy poblados en cada estado vibracional y muchas de las transiciones rovibracionales en las cuales ellos están involucrados son ópticamente opacas (p.e., las transiciones fundamentales con J pequeño en las Regiones I y II). Por lo tanto, se puede obtener de ellas poca información. No obstante, hay todavía muchas líneas en ETL que no son tan espesas (o incluso son delgadas) en las bandas calientes en toda la envoltura y en las transiciones fundamentales en las Regiones II y III (ver Figura 4.8). Podemos determinar el perfil de la temperatura cinética ajustando simultáneamente varias líneas con J pequeña e intermedia de la banda fundamental y

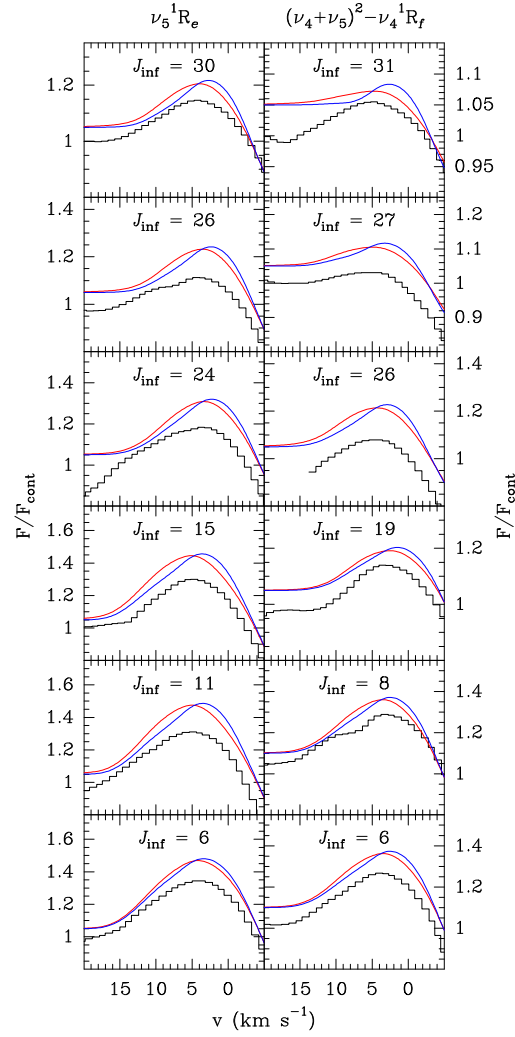


FIGURA 4.10.— Efecto de la velocidad de microturbulencia en los ajustes de las líneas de C_2H_2 . Los ajustes de las dos ramas elegidas ($\nu_5(\pi_u)R_e$ y $\nu_4 + \nu_5(\delta_u) - \nu_4(\pi_g)R_f$) han sido realizados con dos velocidades de microturbulencia en la superficie estelar: 5 km s^{-1} (azul) y 30 km s^{-1} (rojo). Para permitir una correcta comparación hemos representado, junto con los ajustes anteriores, la componente en emisión de las líneas observadas. Las componentes en emisión de los perfiles ajustados correspondientes a 5 km s^{-1} son más estrechas que las generadas a partir de una velocidad de 30 km s^{-1} y éstas últimas parecen representar mejor las líneas observadas, si bien ambos conjuntos de ajustes son compatibles con las observaciones.

bandas calientes con una energía relativamente pequeña. La relación entre las intensidades de líneas rovibracionales adyacentes en ETL en una banda dada nos permite derivar T_K . Nótese que en este proceso es necesario obtener las temperaturas vibracionales y las abundancias moleculares al mismo tiempo que T_K . Discutiremos esta determinación en la Sección 4.4.5.

Hemos fijado la temperatura cinética a $r = 1 R_*$ igual a la temperatura de la estrella central. Para las Regiones I y II, T_K en R_{d1} y R_{d2} están considerados como parámetros libres, y con ellos podemos determinar completamente el valor del exponente. El exponente de la temperatura obtenido es 0.58 para las Regiones I y II, mientras que los ajustes apoyan la hipótesis hecha por la que $\alpha = 1.0$ sobre la Región III.

El perfil de la temperatura cinética derivado del mejor ajuste a todas las líneas del acetileno es:

$$T_K(r) = \begin{cases} 2330 (r/R_*)^{-0.58}, & \text{Región I} \\ 900 (r/R_{d1})^{-0.58}, & \text{Región II} \\ 400 (r/R_{d2})^{-1.00}, & \text{Región III} \end{cases} \quad (4.2)$$

4.4.4. Temperaturas rotacionales, T_{rot}

Una estimación precisa de las temperaturas rotacionales necesita de un modelo sofisticado que incluya parámetros moleculares como son los coeficientes colisionales entre niveles rotacionales y rovibracionales, que actualmente son desconocidos o muy imprecisos para la mayor parte de las moléculas. Sin embargo, mediante el uso del modelo que hemos desarrollado, es posible obtener una primera estimación de las temperaturas rotacionales y vibracionales para todas las transiciones observadas en las tres Regiones definidas anteriormente, eliminando la necesidad de un conocimiento más profundo que el actual en cuanto a la microfísica de las moléculas estudiadas.

El procedimiento para obtener los perfiles de T_{rot} es:

1. T_K y las temperaturas vibracionales se obtienen modelando las transiciones rovibracionales entre niveles con energías rotacionales pequeñas o intermedias (ver Sección 4.4.3).
2. Inicialmente, todos los niveles rovibracionales se consideran en ETL, incluidos los más energéticos.
3. Variamos T_{rot} para los niveles con J grande en cada estado vibracional hasta ajustar las líneas observadas. Se considera que T_{rot} depende de J parabólicamente.
4. En la siguiente iteración, el paso 3 se repite para la siguiente transición rovibracional de la banda considerada.

En cada paso, las intensidades de todas las líneas son recalculadas puesto que un cambio en la temperatura rotacional de uno de los niveles implica una variación en las opacidades del resto de las líneas. Conforme las transiciones estudiadas incluyen niveles de mayor energía, la variación que sufren las opacidades de las transiciones ajustadas por cambios en la temperatura rotacional se hace más y más pequeña. El proceso se repite hasta la convergencia para cada banda. Las líneas que no se han incluido en los ajustes en este estudio pertenecen a transiciones rovibracionales que incluyen los estados vibracionales con energías mayores. La razón de esta decisión es que los perfiles de estas líneas comienzan a presentar muchas irregularidades probablemente generadas por inhomogeneidades en el medio cercano a la estrella y su estudio ha sido aplazado temporalmente. La ejecución del código en dos o tres ocasiones suele ser suficiente para ajustar las líneas correctamente, con un tiempo de cálculo de unos 10 s por línea. Desafortunadamente, para ajustar las líneas de las bandas calientes es con frecuencia necesario repetir los ajustes de líneas que incluyen estados vibracionales de menor energía: el nivel superior de una transición ópticamente opaca puede ser, a la vez, el nivel inferior de una ópticamente transparente.

Como ya se discutió anteriormente, se puede considerar que T_{rot} es igual a T_K en las zonas más internas para los niveles con J pequeña e intermedia en estados vibracionales poco energéticos. No obstante, para niveles rotacionales con J grande en estados vibracionales muy energéticos, hemos encontrado que T_{rot} es menor que T_K , incluso cerca de la fotosfera. Además, para algunas transiciones específicas, ha sido necesario incluir temperaturas rotacionales *ad hoc* para ajustar los datos (ver Tabla 4.2). Parece ser usual encontrar dos o tres temperaturas rotacionales *ad hoc* que se separan significativamente de la temperatura cinética en un sólo nivel vibracional por debajo de $J \simeq 30 - 35$. Estas temperaturas rotacionales *anómalas* no están relacionadas con grandes interferencias telúricas ni se encuentran efectos

TABLA 4.2.— Temperaturas rotacionales *ad hoc* del C₂H₂ y HCN

C ₂ H ₂			HCN	
G.S.(σ_g^+)	$\nu_4(\pi_g)$	$\nu_5(\pi_u)$	G.S.(σ^+)	$\nu_2(\pi)$
35(900,50)	26(620,200)	20(900,200)	20(900,250)	25(250,35)
36(900,60)	32(425,100)	26(900,150)	24(640, 85)	
	34(425,100)	32(620,200)		

Temperaturas rotacionales *ad hoc* del C₂H₂ y el HCN para los niveles vibracionales de menor energía. Los números se muestran de acuerdo a la nomenclatura $J(T_{\text{rot}}(R_{d1}), T_{\text{rot}}(R_{d2}))$, donde J es el nivel rotacional que necesita una T_{rot} *ad hoc* y las temperaturas están expresadas en K (ver Sección 3.3.4). El resto de las temperaturas rotacionales se pueden describir mediante dependencia suave con J . Nosotros sólo consideraremos niveles rotacionales que intervengan en transiciones rovibracionales hasta $J = 35 - 40$, dependiendo de la banda. Posiblemente deban ser añadidas nuevas temperaturas *ad hoc* para niveles con J mayor.

instrumentales que puedan afectar el perfil de las líneas. Además, las líneas con J grande están en una parte de la atmósfera más favorable para la observación que las tienen un J pequeño, y estas últimas parecen estar en ETL con bastante precisión (ver Figura 4.11). Así pues, estos efectos podrían reflejar procesos físicos reales como efectos de coeficientes de colisión, efectos de bombeo radiativo selectivos o solapamientos de estas líneas con otras no identificadas (ver [Fonfría Expósito et al., 2006](#)).

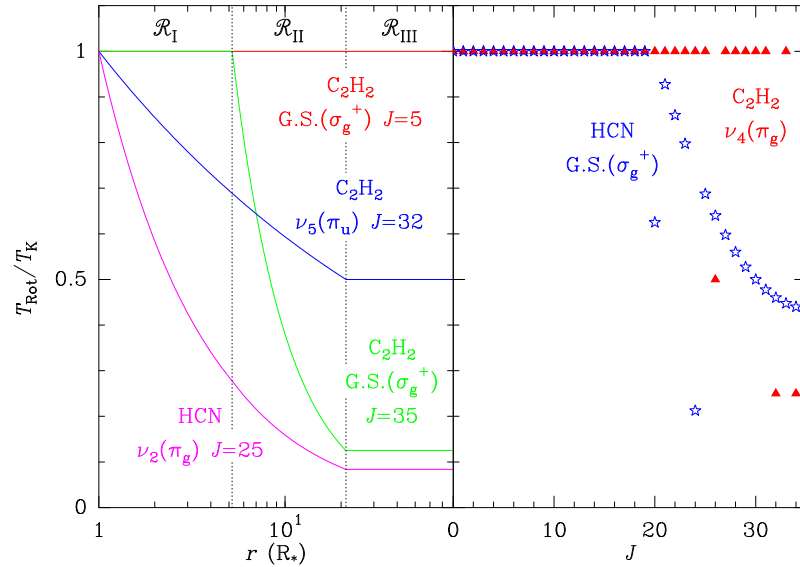


FIGURA 4.11.— Temperatura rotacional para algunos niveles del C₂H₂ y del HCN. En el cuadro de la izquierda se muestra la temperatura rotacional para algunos niveles del C₂H₂ y del HCN dependiente del radio. En la de la derecha, la temperatura rotacional para algunos niveles vibracionales del C₂H₂ y del HCN a $r = R_{d2}$, dependiente de J . La temperatura rotacional es menor o igual a la temperatura cinética a lo largo de la CSE (izquierda). Para ajustar las transiciones rovibracionales a veces es necesario la introducción de temperaturas rotacionales *ad hoc*. En general T_{rot} decrece suavemente con J (derecha).

En la mayor parte de los casos, hemos encontrado que T_{rot} es igual a T_k para niveles con $J \lesssim 20 - 30$ (dependiendo del estado vibracional). Sin embargo, para las líneas con valores de J grandes, T_{rot} es sistemáticamente menor que T_k . Este hecho parece indicar que las

condiciones físicas sobre la CSE interna no son las apropiadas para mantener los niveles con J grande en ETL, como asumimos en la Sección 3.3.1.

4.4.5. Temperaturas vibracionales

Las temperaturas vibracionales han sido determinadas a partir de los ajustes de las intensidades de línea no realizando cálculos de transferencia de radiación fuera de ETL, aunque es posible explicar las poblaciones por medio de excitaciones radiativas.

Algunos niveles excitados del C_2H_2 están conectados con el nivel fundamental sólo mediante colisiones y cascadas radiativas (ν_4 , banda activa mediante transiciones Raman), mientras que otros están conectados a través de colisiones y absorción directa de fotones (ν_5 , banda activo en el IR). Además, las reglas de selección para el C_2H_2 permiten solamente las transiciones radiativas desde estados vibracionales *gerade* a *ungerade* y viceversa (ver Sección 2.1.5). En consecuencia, cerca de la estrella las colisiones con H_2 y He podrían desempeñar un papel importante en el bombeo de los niveles vibracionales poco energéticos. Igualmente, el bombeo de los niveles vibracionales poco energéticos podría ser realizado también a través de absorción de fotones del IR cercano emitidos por la estrella y el polvo. Estos fotones bombearían el C_2H_2 desde el nivel fundamental al modo de tensión más intenso, $\nu_3(\sigma_u^+)$, y sus bandas de combinación, $\nu_3 + \nu_4(\pi_u)$, $\nu_3 + \nu_5(\pi_g)$, y $\nu_2 + \nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+)$ (ver Capítulo 2), seguido por un decaimiento radiativo hasta los modos de flexión (Cerni-charo et al., 1999). Estas transiciones infrarrojas son intensas ($\nu_3(\sigma_u^+)$), medias ($\nu_3 + \nu_4(\pi_u)$, $\nu_3 + \nu_5(\pi_g)$) y muy intensas ($\nu_2 + \nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+)$), como indican Mandin et al. (2005) y Herzberg II (1989, pág. 290).

El bombeo radiativo a través de $\nu_3(\sigma_u^+)$ y sus bandas de combinación es sólo efectivo en la región más interna de la CSE. Más allá, la absorción de los fotones del infrarrojo medio procedentes de la estrella y del polvo bombean el C_2H_2 desde el estado fundamental hasta ν_5 y desde ν_4 y ν_5 hasta su banda de combinación, $\nu_4 + \nu_5$, y otros niveles vibracionales como sus sobretonos. Para $r > 20 R_*$, el número de fotones disponibles en el infrarrojo cercano está fuertemente reducido debido a la absorción del polvo. No obstante, el bombeo de $\nu_5(\pi_u)$ es eficiente hasta regiones de la CSE más lejanas gracias a la existencia de una cantidad apreciable de fotones emitidos a $\simeq 14 \mu m$ (que corresponde al máximo de emisión de un cuerpo negro con $T_{bb} \simeq 200$ K, según la ley de Wien). Por lo tanto, esperamos que las temperaturas vibracionales, T_{vib} , se aparten de T_K conforme la distancia a la estrella aumenta.

Para estimar T_{vib} hemos seleccionado inicialmente algunas líneas con J pequeño de cada banda vibracional observada. El modelado posterior del resto de las líneas que están en ETL nos ha permitido determinar con mayor precisión las temperaturas vibracionales. Definamos T_{ev} como la temperatura de excitación entre dos estados vibracionales adyacentes o no, que depende de T_{vib} y que controla la población del nivel vibracional superior con respecto al inferior. Es por ello por lo que las temperaturas vibracionales están acopladas con la abundancia de la especie molecular considerada. Así pues, un procedimiento iterativo que incluya T_K , T_{ev} (que depende de T_{vib}) y la abundancia requiere obtener al mismo tiempo, ajustando las líneas rovibracionales observadas, las poblaciones de todos los niveles rotacionales con J s pequeñas e intermedias pertenecientes a los estados vibracionales en ETL con energía pequeña y moderada. Como veremos en la sección 4.4.6, el primer paso en este procedimiento es la estimación de las abundancias sobre toda la envoltura. La T_{vib} resultante para el C_2H_2 está mostrada en la Tabla 4.3, habiendo sido definida T_{vib} como referida al estado vibracional de menor energía (ver Ec. 3.34). Las Figuras 4.12 y 4.13 muestran las poblaciones obtenidas, P_i , de los niveles vibracionales observados y T_{ev} , respectivamente.

El análisis de las temperaturas vibracionales y las poblaciones obtenidas (comparadas con aquellas en ETL) indica que:

- En la envoltura más interna (Región I), la población del estado fundamental es menor

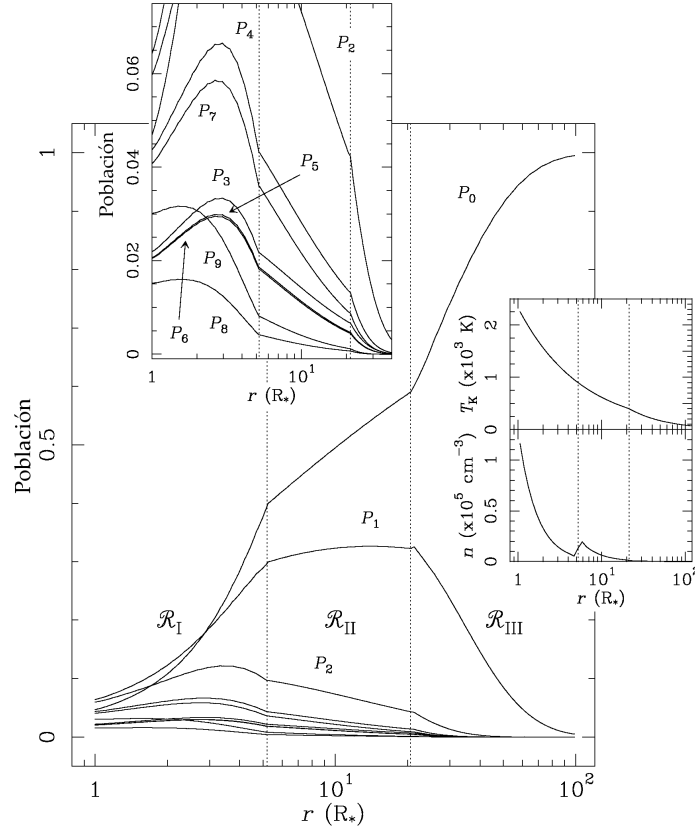


FIGURA 4.12.— Las poblaciones, P , de los estados vibracionales del C₂H₂. Los niveles se nombran como sigue: $P_0 \equiv P[\text{G.S.}(\sigma_g^+)]$, $P_1 \equiv P[\nu_4(\pi_g)]$, $P_2 \equiv P[\nu_5(\pi_u)]$, $P_3 \equiv P[2\nu_4(\sigma_g^+)]$, $P_4 \equiv P[2\nu_4(\delta_g)]$, $P_5 \equiv P[\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+)]$, $P_6 \equiv P[\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-)]$, $P_7 \equiv P[\nu_4 + \nu_5(\delta_u)]$, $P_8 \equiv P[2\nu_5(\sigma_g^+)]$ y $P_9 \equiv P[2\nu_5(\delta_g)]$. Los niveles π y δ están desdoblados en dos subniveles con paridades opuestas, e y f (ver Sección 2). En la Figura estos subniveles han sido fundidos en un único nivel con degeneración 2. Sólo hemos incluido los niveles vibracionales hasta $2\nu_5(\delta_g)$ aunque en los cálculos hemos considerado niveles de mayor energía. El gráfico principal contiene los niveles vibracionales, mientras que el cuadro superior es una ampliación del cuadro principal que muestra los niveles de mayor energía. Los cuadros de la derecha contienen la densidad de C₂H₂ (en cm⁻³, inferior) y la temperatura cinética (en K, superior).

que para los niveles ν_4 y ν_5 porque están doblemente degenerados (paridades e y f) mientras que el fundamental es un nivel vibracional únicamente con paridad e . La T_K y el intenso campo de radiación cerca de la estrella son capaces de bombear una gran cantidad de moléculas a niveles muy energéticos (ver Figura 4.12; $2\nu_5(\delta_g)$ está a $\simeq 2100$ K).

- $\nu_4(\pi_g)$ es un nivel vibracional metaestable (ver Figura 2.2). No está conectado radiativamente con el estado fundamental a través de transiciones dipolares eléctricas. Las colisiones y/o cascadas radiativas son sus principales mecanismos de bombeo.
- Casi todos los niveles vibracionales, excepto $\nu_5(\pi_u)$ y $2\nu_5(\sigma_g^+)$, pueden ser considerados en ETL en la Región I. $\nu_5(\pi_u)$ está fuera de ETL por la fuerza de la conexión radiativa con el estado fundamental (el momento dipolar de la transición es $\mu \simeq 0.31$ D, Jacquemart et al. 2001). La población del nivel $2\nu_5(\sigma_g^+)$ está desviada de

TABLA 4.3.— Temperaturas vibracionales del C₂H₂

Nivel vib.	P_i	T_1 (K)	α_1	T_2 (K)	α_2	T_3 (K)	α_3
G.S.	P_0	2330	0.58	900	0.19	685	1.00
$\nu_4(\pi_g)$	P_1	2330	1.66	150	0.43	82	1.00
$\nu_5(\pi_u)$	P_2	2330	0.58	900	0.26	625	1.00
$2\nu_4(\sigma_g^+)$	P_3	2330	0.58	900	0.58	400	1.00
$2\nu_4(\delta_g)$	P_4	2330	0.58	900	0.58	400	1.00
$\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+)$	P_5	2330	0.58	900	0.58	400	1.00
$\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-)$	P_6	2330	0.58	900	0.58	400	1.00
$\nu_4 + \nu_5(\delta_u)$	P_7	500	0.98	100	0.16	80	1.00
$2\nu_5(\sigma_g^+)$	P_8	2330	0.58	900	1.40	125	1.00
T_K	—	2330	0.58	900	0.58	400	1.00

T_1 es la temperatura vibracional muy cerca de la fotosfera estelar, T_2 en la capa interna de formación de polvo ($r = 5.2 R_*$) y T_3 en la capa externa de formación de polvo ($r = 21.2 R_*$). α_1 , α_2 y α_3 son los exponentes de la ley de potencias de las temperaturas ($r^{-\alpha}$) en las Regiones I, II y III, respectivamente. Nótese que la temperatura vibracional del nivel $\nu_4 + \nu_5(\delta_u)$ es muy pequeña incluso cerca de la superficie estelar. Hemos incluido T_K en la última fila de la Tabla para facilitar las comparaciones.

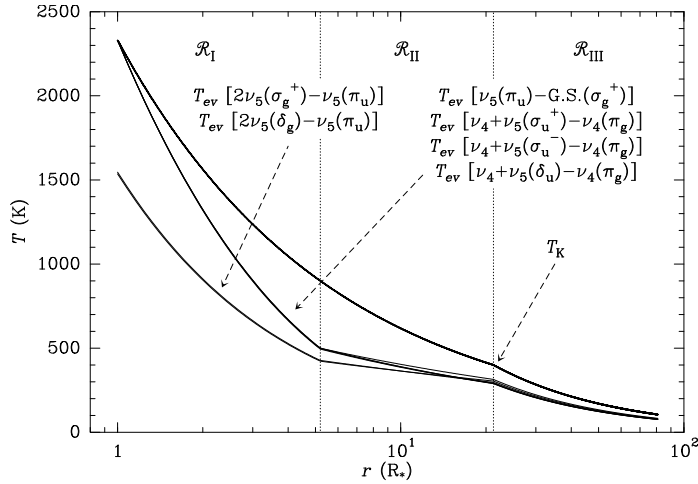


FIGURA 4.13.— Temperaturas cinética y de excitación vibracional para las transiciones observadas del C₂H₂. Las T_{ev} están fundidas en dos grupos distintos. A pesar de la similitud de los momentos dipolares de las transiciones, $T_{ev}[2\nu_5(\sigma_g^+) \leftrightarrow \nu_5(\pi_u)]$ y $T_{ev}[2\nu_5(\delta_g) \leftrightarrow \nu_5(\pi_u)]$ son bastante distintas de $T_{ev}[\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^\pm) \leftrightarrow \nu_4(\pi_g)]$, $T_{ev}[\nu_4 + \nu_5(\delta_u) \leftrightarrow \nu_4(\pi_g)]$ y $T_{ev}[\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+)]$. Todos los niveles vibracionales estudiados están fuera de ETL en toda la envoltura. Nótese que $2\nu_5(\sigma_g^+)$ y $2\nu_5(\delta_g)$ están fuera de ETL incluso cerca de la estrella.

ETL en toda la CSE, incluso cerca de la superficie estelar ($2P_8/P_7 < 2P_8/P_7|_{\text{LTE}}$)¹, porque está conectado radiativamente con $\nu_5(\pi_u)$ (el momento dipolar de la transición $2\nu_5(\sigma_g^+) \leftrightarrow \nu_5(\pi_u)$ es similar al de $\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+)$).

- La dependencia radial de la población de todos los niveles vibracionales varía en

¹Hemos añadido el factor 2 para tener en cuenta que el estado 8, es decir, $2\nu_5(\sigma_g^+)$ sólo tiene niveles roviibracionales con paridad e mientras que el estado 7, es decir, $\nu_4 + \nu_5(\delta_g)$ está desdoblado y sus niveles roviibracionales tienen paridades e y f . De este modo ese cociente es simplemente el factor de Boltzmann correspondiente sin necesidad de tener en cuenta la degeneración de cada estado. Haremos lo mismo con el resto de los estados vibracionales a lo largo de esta discusión y de las relativas al H¹³CCH, HCN y H¹³CN.

la Región II con respecto a la Región I: la pendiente de P_0 y P_1 cae mientras que se incrementa para otros niveles. La absorción de radiación a $3\ \mu\text{m}$ que bombea al C₂H₂ desde el nivel fundamental a estados con una energía muy grande, cambia la pendiente de la población del estado fundamental con respecto al que tendría en ETL en las Regiones I y II. Esta radiación también afecta al estado $\nu_4(\pi_g)$ que empieza a ser bombeado eficientemente por medio de una cascada radiativa desde los modos de tensión. Por ello, $P_1/2P_0$ es mayor de lo esperado en ETL en las Regiones II y III. Sin embargo, como la transición $\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+)$ es intensa, la razón P_2/P_1 es menor de lo que sería en ETL. Las poblaciones de todos los niveles vibracionales por encima de ν_5 están por debajo de las correspondientes a ETL en la Región II. Las colisiones son menos eficientes porque la densidad es pequeña y todo el bombeo vibracional está dominado por la absorción radiativa.

- $2\nu_4(\sigma_g^+)$ y $2\nu_4(\delta_g)$ son estados metaestables como el $\nu_4(\pi_g)$ por lo que sus poblaciones deben ser mayores que en ETL. Por otro lado, $\nu_5(\pi_u)$ está conectado radiativamente con el estado fundamental. Es por ello por lo que $2P_3/P_2$ es mayor de lo que sería en ETL para $r > R_{d1}$.
- P_6/P_5 es mayor en la Región II de lo esperado en ETL. Las poblaciones de los estados vibracionales $\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+)$, $\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-)$ y $\nu_4 + \nu_5(\delta_u)$ aumentan de manera similar debido a las cascadas radiativas desde niveles de mayor energía. No obstante, la transición radiativa intensa $\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+)$ (Herzberg II, 1989, pág. 290) incrementa la razón P_6/P_5 , por desexcitación estimulada de moléculas desde $\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+)$ gracias a radiación de $7.5\ \mu\text{m}$. Este mecanismo está potenciado por el hecho de que la transición $\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+)$ es prohibida.
- $P_4/2P_3$, $2P_5/P_4$ y $P_7/2P_6$ son consistentes con lo esperado en ETL pues estos niveles están separados por energías de 4.5, 136.1 y 10.9 K, respectivamente. Como los niveles $\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-)$ y $\nu_4 + \nu_5(\delta_u)$ no están conectados radiativamente con el fundamental, las colisiones mantienen $P_7 \simeq 2P_6$ (ver Figura 4.12). Podría haber desviaciones de ETL de la razón $2P_5/P_4$ porque el estado $\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+)$ está conectado radiativamente con el estado fundamental y porque en la Región III la temperatura cinética es bastante pequeña ($T_K(100\ R_*) \simeq 85\ \text{K}$), aunque estas desviaciones no pueden ser estimadas a partir de los datos observacionales de los que disponemos.
- Para distancias mayores que $20\ R_*$ (Región III), sólo los niveles de menor energía están significativamente poblados. La transición más intensa que se da en la envoltura externa es $\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+)$. En las zonas lejanas a la estrella, no es observable ninguna emisión por parte del C₂H₂ debido a que esta especie molecular no presenta espectro rotacional.
- Como en la Región II, $P_1/2P_0$ en la Región III es mayor de lo que debería ser en ETL, pero decrece rápidamente como en el caso en ETL. Esto es consecuencia de la absorción de radiación del infrarrojo medio en la Región III. Esta radiación excita las moléculas desde el estado ν_4 hasta el $\nu_4 + \nu_5$ y las moléculas se desexcitan al nivel fundamental. El mecanismo de bombeo a $3\ \mu\text{m}$, tan importante en la Región II, pierde su efectividad a distancias mayores que R_{d2} por el decrecimiento que sufre la intensidad de la radiación del infrarrojo cercano al ser reabsorbida por el propio polvo y diluida geométricamente. Además, como la densidad de gas y la T_K son pequeñas, las colisiones no son efectivas a la hora de desexcitar las moléculas desde el nivel $\nu_4(\pi_g)$. Así pues, no es posible encontrar apenas moléculas en este nivel en la envoltura externa.
- $P_9/2P_8$ es consistente con lo esperado en ETL en la Región I pero parece desviarse en las Regiones II y III. $2\nu_5(\sigma_g^+)$ está conectado radiativamente con el fundamental a través de las transiciones $2\nu_5(\sigma_g^+) \leftrightarrow \nu_2 + \nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+)$ y $2\nu_5(\sigma_g^+) \leftrightarrow \nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+)$. Por el contrario, $2\nu_5(\delta_g)$ está conectado con el nivel fundamental

a través de las transiciones $2\nu_5(\delta_g) \leftrightarrow \nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+)$ pero no por $2\nu_5(\delta_g) \leftrightarrow \nu_2 + \nu_4 + \nu_5(\delta_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+)$ porque $\nu_2 + \nu_4 + \nu_5(\delta_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+)$ es prohibida. Por lo tanto, cuando el bombeo colisional pierde su efectividad ($r > R_{d1}$), $P_9/2P_8$ se hace menor que en ETL.

Las poblaciones estimadas de los estados $2\nu_4(\sigma_g^+)$ y $2\nu_4(\delta_g)$ están peor determinadas que las del resto de los estados vibracionales porque las líneas observadas que incluyen estos niveles son débiles y no han sido modeladas. Estos niveles son estados metaestables y están conectados radiativamente con estados más energéticos a través de transiciones poco intensas, lo que implica que sus poblaciones deben ser algo mayores que en ETL. Es por ello que pensamos que el considerar a estos estados en ETL es una aproximación aceptable.

La influencia que estas incertidumbres tienen en el resto de los niveles es prácticamente nula puesto que las temperaturas de excitación de las transiciones rovibracionales no dependen de las temperaturas vibracionales (aunque se pueden escribir en función de ellas). Además, estas incertidumbres tienen consecuencias en la función de partición y, por tanto, en la intensidad de línea. Muy cerca de la estrella, todos los estados se pueden considerar en ETL. Conforme nos alejamos de la estrella, muchos estados se van desviando de ETL al reducirse las temperaturas de excitación, lo que supone que la influencia de los estados $2\nu_4$ en la función de partición se reduce. Por tanto, las correcciones que sería necesario hacer a la función de partición son pequeñas y no modificarían apenas los perfiles sintéticos.

4.4.6. Abundancias

La condensación de las moléculas refractarias en los granos de polvo sobre las dos zonas de aceleración modifica las abundancias de varias especies moleculares. No está claro en qué grado el acetileno condensa sobre los granos de polvo pero nuestros datos nos permiten verificar si se producen o no cambios significativos de una Región a otra.

Como veremos más adelante (ver Sección 4.7), la abundancia en la Región I presenta grandes incertidumbres debido a su pequeña influencia en la mayor parte de las líneas observadas comparado con el resto de la CSE. El tamaño angular de la región más interna de la CSE es pequeño ($\simeq 0''.2$) y, a pesar de la gran densidad y T_K existentes, el flujo observado es igualmente pequeño con respecto al flujo procedente de capas más externas de la envoltura. Por otro lado, la Región II (con un diámetro angular $\simeq 0''.8$) se corresponde con la zona de máxima transmisividad del telescopio (con una PSF con anchura $\simeq 1''$). Las pérdidas de luz en la rendija de entrada del monocromador, que tiene una anchura de $\simeq 1''.6$, no es todavía suficientemente importante para la Región II pero sí para una gran parte de la radiación emitida por la Región III. Además, T_K y la densidad tienen todavía valores altos en la Región II (T_K y la densidad media para el C_2H_2 son $\simeq 560$ K y 220 cm^{-3} , respectivamente). Por lo tanto, la mayor parte de la emisión para líneas ópticamente opacas (que se extienden hasta más allá de R_{d1}) y la absorción más intensa para líneas delgadas (producidas en la Región I) son debidas a la Región II. En la Región III, T_K y la densidad son pequeñas de tal modo que incluso antes de hacer los ajustes sabemos que la emisión/absorción de esta región debe ser pequeña. Es más, la Región III sufre la mayor parte de la pérdida de luz en la rendija de entrada y que afecta solamente a la componente en emisión de las líneas ópticamente opacas. Así pues, la máxima información sobre la abundancia de C_2H_2 en la Región III se puede obtener de la zona de absorción en los perfiles P-Cygni de estas líneas gruesas. Desafortunadamente, su gran espesor óptico evita la posibilidad de obtener información precisa sobre las abundancias del C_2H_2 para ángulos mayores que $1''$ ($r > 50 R_*$). A mayores distancias, la componente en absorción de las líneas está casi completamente saturada y a más de $300 R_*$ no hay emisión por parte del C_2H_2 (ver Figura 4.12) y las transiciones rotacionales puras están prohibidas debido a la falta de momento dipolar eléctrico.

Las abundancias de C_2H_2 obtenidas a través de los mejores ajustes para cada región son:

$$x_{\text{C}_2\text{H}_2}(r) = \begin{cases} 7.5 \times 10^{-6}, & \text{Región I} \\ 8.0 \times 10^{-5}, & \text{Región II} \\ 8.0 \times 10^{-5}, & \text{Región III} \end{cases} \quad (4.3)$$

habiendo considerado un valor inicial de 8×10^{-5} para toda la CSE. La densidad de columna que se obtiene para el C_2H_2 es $\simeq 1.6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2}$, mientras que para el H_2 es $\simeq 1.1 \times 10^{24} \text{ cm}^{-2}$.

Nótese que la abundancia en la Región I es un orden de magnitud menor que en el resto de la envoltura. Obtener una abundancia menor en esa región implica disminuir su tamaño, dando valores incompatibles con los resultados previos encontrados en la literatura (ver Sección 4.3). Discutiremos este punto en la Sección 4.7. Las abundancias de C_2H_2 en las Regiones II y III son similares a las obtenidas en estudios anteriores (Keady & Ridgway, 1993; Cernicharo et al., 1999).

Además, el incremento en la abundancia de C_2H_2 entre las Regiones I y II es compatible con el obtenido a partir de cálculos en ETL (M. Agúndez, comunicación privada) y con los resultados de la química en una estrella pulsante publicados por Cherchneff (2006). El valor de la abundancia en ETL entre las Regiones I y II varía entre un 15 % y un 99 % (con respecto a la abundancia en la Región II), dependiendo de las condiciones físicas en las regiones más internas de la CSE (Agúndez & Cernicharo, 2006). La acción de choques en las abundancias químicas a distancias menores que $5 R_*$ produce perfiles con incrementos del 99 % en la abundancia en la Región II (Cherchneff, 2006). Ambos modelos podrían explicar la variación del 90 % obtenida en este trabajo. Discutiremos esto en la Sección 4.7.

Los errores en las abundancias (ver Tabla 4.6) son compatibles con una pequeña condensación de acetileno en granos de polvo y la consecuente existencia de un régimen de aceleración entre las Regiones II y III. Por desgracia, no podemos asegurar la existencia de estos procesos con nuestros datos.

4.5. Modelado de H^{13}CCH y $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$

Como en el caso del C_2H_2 , podemos obtener la abundancia, las temperaturas vibracionales y restringir los valores de los parámetros relativos a las condiciones físicas de la CSE, a través del ajuste de tantas líneas de H^{13}CCH como sea posible. El procedimiento de ajuste es el mismo que para el C_2H_2 (ver Sección 4.4). Para realizar dichos ajustes hemos utilizado las condiciones físicas determinadas previamente con C_2H_2 como valores iniciales.

4.5.1. Abundancias

La razón $[\text{C}_2\text{H}_2]/[\text{H}^{13}\text{CCH}]$ es fácilmente determinable teniendo en cuenta que la abundancia de H^{13}CCH debe ser proporcional a la de C_2H_2 . Así,

$$\frac{[\text{C}_2\text{H}_2]}{[\text{H}^{13}\text{CCH}]} \simeq \frac{1}{0.049} \simeq 20.5, \quad (4.4)$$

donde las líneas ajustadas se muestran en la Tabla 4.1. Este valor es muy parecido a $[\text{C}_2\text{H}_2]/[\text{H}^{13}\text{CCH}] \simeq 22$, propuesto por Cernicharo et al. (1996b, 1999, 2000). La razón de abundancias $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ obtenido a partir de nuestros datos es $\simeq 41$ en IRC+10216.

4.5.2. Temperaturas vibracionales

Como se muestra en el Capítulo 2, el espectro del H^{13}CCH presenta algunas diferencias con respecto al C_2H_2 (p.e., la transición $\nu_4(\pi) - \text{G.S.}(\sigma^+)$ es activa en el IR para el H^{13}CCH

mientras que está prohibida para el C_2H_2). Por tanto, aunque el $H^{13}CCH$ sea muy parecido al C_2H_2 , sus temperaturas vibracionales son distintas (ver Tabla 4.4 y la Figura 4.14). Las transiciones observadas del $H^{13}CCH$ también sustentan el mecanismo de bombeo con

TABLA 4.4.— Temperaturas vibracionales del $H^{13}CCH$

Nivel vib.	P_i	T_1 (K)	α_1	T_2 (K)	α_2	T_3 (K)	α_3
G.S.	P_0	2330	0.58	900	0.56	410	1.00
$\nu_4(\pi)$	P_1	2330	0.58	900	1.92	60	1.00
$\nu_5(\pi)$	P_2	2330	0.58	900	1.43	120	1.00
$2\nu_4(\sigma^+)$	P_3	2330	0.58	900	0.58	400	1.00
$2\nu_4(\delta)$	P_4	2330	0.58	900	0.58	400	1.00
$\nu_4 + \nu_5(\sigma^+)$	P_5	2330	0.58	900	0.58	400	1.00
$\nu_4 + \nu_5(\sigma^-)$	P_6	2330	0.58	900	0.58	400	1.00
$\nu_4 + \nu_5(\delta)$	P_7	2330	0.93	500	2.78	10	1.00
$2\nu_5(\sigma^+)$	P_8	2330	0.58	900	0.58	400	1.00
T_K	—	2330	0.58	900	0.58	400	1.00

Ver la Tabla 4.3 para entender el significado de las constantes.

radiación del IR cercano propuesto en la Sección 4.4.5. Hay más transiciones permitidas desde niveles de combinación que incluyen modos de tensión y flexión para el $H^{13}CCH$ que para el C_2H_2 . Así pues, estas diferencias pueden ser entendidas en términos de las rutas de bombeo radiativo para ambos isotopómeros.

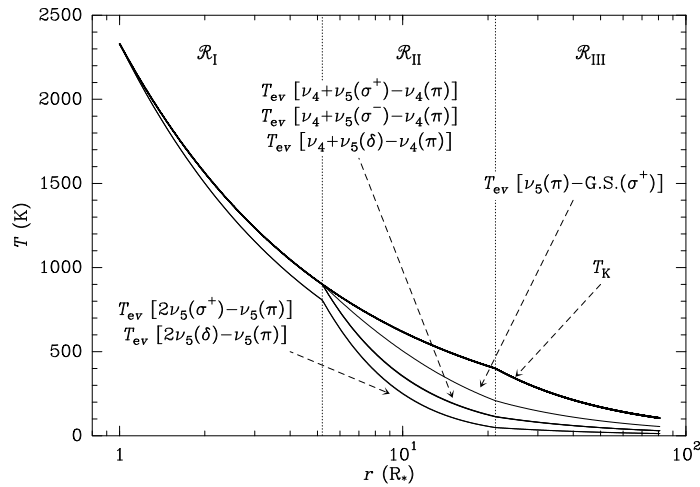


FIGURA 4.14.— Temperaturas cinética y de excitación vibracional para las transiciones observadas del $H^{13}CCH$. Al igual que para el C_2H_2 , las T_{ev} forman varios grupos distintos aunque en este caso la transición $\nu_5(\pi) \leftrightarrow G.S.(\sigma^+)$ queda separada del resto con una T_{ev} no mucho menor que la T_K . Todas las transiciones seleccionadas están en ETL en la Región I.

- Sobre la Región I, la población de $2\nu_5(\sigma^+)$ es menor que en ETL comparado con la de $\nu_4 + \nu_5(\delta)$. Las cascadas radiativas desde niveles de energía grande pueblan estos estados de un modo distinto que en el caso del C_2H_2 (p.e., $\nu_3 + \nu_5 \leftrightarrow 2\nu_5$ está permitido para el $H^{13}CCH$), manteniendo el nivel $2\nu_5(\sigma^+)$ casi en ETL cerca de la fotosfera (ver Sección 4.4.5). Por lo tanto, todos los niveles vibracionales pueden ser considerados en ETL cerca de la estrella (ver Figura 4.14).

- La conexión existente entre el estado $2\nu_5$ y otros de menor energía a través de transiciones permitidas para el H^{13}CCH y el incremento de la población de ν_5 gracias a la transición $\nu_4 + \nu_5 \leftrightarrow \nu_5$, resultan en una disminución de $T_{\text{ev}}[2\nu_5 \leftrightarrow \nu_5]$ en las Regiones II y III con respecto al caso del C_2H_2 .
- En las Regiones II y III, P_2/P_1 , $2P_3/P_2$ y $2P_8/P_7$ son menores que en ETL, como ocurre para el C_2H_2 . Sin embargo, varias transiciones radiativas del H^{13}CCH , prohibidas para el C_2H_2 , mantienen estas razones cercanas al caso en ETL.
- El estado vibracional $\nu_4(\pi_g)$ del C_2H_2 está conectado únicamente con el estado fundamental colisionalmente, mientras que en el caso del H^{13}CCH la conexión es tanto radiativa como colisional. Este hecho reduce la razón $P_1/2P_0$ y termaliza el estado ν_4 sobre casi toda la CSE. Además, la razón P_2/P_1 es similar a la que encontraríamos en ETL en la Región I, donde las colisiones consiguen termalizar el estado ν_5 , pero está fuera de ETL en las Regiones II y III una vez que T_K y la densidad han decrecido y la excitación radiativa se ha convertido en el principal mecanismo de bombeo. Como la transición $\nu_4 \leftrightarrow \text{G.S.}$ es más débil que $\nu_5 \leftrightarrow \text{G.S.}$ (Di Leonardo et al., 2002), podemos concluir que el bombeo de moléculas desde el estado fundamental hasta los estados ν_4 y ν_5 a través de cascadas radiativas desde estados vibracionales con una gran energía parece ser casi el mismo para ambos estados (ver Figura 2.2).
- La razón $2P_3/P_2$ es menor que en ETL en las Regiones II y III por varias razones: $2\nu_4(\sigma^+)$ está conectado radiativamente con $\nu_4(\pi)$ y el estado fundamental; las moléculas son bombeadas desde el éste último hasta ν_5 a través de cascadas radiativas y el bombeo colisional no es suficientemente eficiente para mantener su población en ETL en estas regiones.
- Como en el caso del C_2H_2 , el modelo indica que $P_4/2P_3$, $2P_5/P_4$ y $P_7/2P_6$ pueden ser considerados en ETL.
- El hecho de que $T_{\text{ev}}[\nu_5(\pi) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma^+)] < T_K$ se puede explicar con la gran intensidad de la transición. Por otro lado, la transición $\nu_4 + \nu_5 \leftrightarrow \nu_5$ podría despoblar $\nu_4 + \nu_5$, siendo este hecho compatible con que $T_{\text{ev}}[\nu_4 + \nu_5 \leftrightarrow \nu_4] < T_{\text{ev}}[\nu_5 \leftrightarrow \text{G.S.}]$, en contraste con el comportamiento de estas temperaturas para el C_2H_2 , donde son iguales.

4.5.3. Temperaturas rotacionales

Al contrario que para el C_2H_2 , todas las líneas del H^{13}CCH quedan bien ajustadas considerando los niveles rotacionales en ETL. Ninguna temperatura *ad hoc* parece ser necesaria.

4.5.4. Buscando $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$

Dada la gran abundancia de C_2H_2 , debería ser posible la detección de líneas rovibracionales de $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$. La doble sustitución de átomos de carbono reduce ostensiblemente la abundancia de esta especie con respecto al isotópomo principal. Como hemos visto en la Sección 4.5, $[^{12}\text{C}]/[^{13}\text{C}] \simeq 41$ lo que significa que $[^{13}\text{C}_2\text{H}_2]/[\text{C}_2\text{H}_2] \simeq (1/41)^2 \simeq 6 \times 10^{-4}$. Desafortunadamente, las bandas más intensas del $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$ están precisamente en un rango del espectro lleno de líneas intensas del C_2H_2 , H^{13}CCH y HCN (ver Figura 4.1). Hemos comparado la profundidad óptica de una de las líneas más intensas del $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$, $\nu_5(\pi_u)\text{R}_e(3)$, con la misma línea para el C_2H_2 . El momento dipolar empleado en los cálculos para el $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$ ha sido tomado igual al momento dipolar de esa transición para el C_2H_2 . La profundidad óptica de esta línea ha sido calculada ejecutando el código con los parámetros derivados de los ajustes de las líneas observadas de C_2H_2 y usando la relación dada anteriormente como el cociente de abundancias $x(^{13}\text{C}_2\text{H}_2)/x(\text{C}_2\text{H}_2)$. Las profundidades ópticas obtenidas a lo largo de la línea de mirada, sin considerar el efecto Doppler, son 630

para el C_2H_2 y 0.033 para el $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$. Una profundidad óptica tan pequeña para la línea del $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$ resulta en una absorción máxima de $< 1\%$ del flujo del continuo y no puede ser observada en nuestros datos. La misma absorción, o incluso menor, se espera para otras líneas de la misma banda.

4.6. Modelado del cianuro de hidrógeno, HCN y H^{13}CN

El modelado de líneas de HCN (y H^{13}CN) añade restricciones adicionales a las condiciones físicas obtenidas a partir de los modelados del C_2H_2 y H^{13}CCH para $r < 100 R_*$. El espectro mostrado en las Figuras 4.1–4.6 indica la presencia de muchas líneas rovibracionales pertenecientes a la banda ν_2 y varios sobretonos asociados. Como para el acetileno, hemos elegido una muestra de líneas de HCN (y H^{13}CN) para ser ajustadas y obtener así las condiciones físicas y químicas en la envoltura (véanse algunos ajustes en la Figura 4.15). La observación de los sobretonos del HCN y de las transiciones del H^{13}CN nos permiten estudiar líneas ópticamente más transparentes que aquellas de la banda fundamental.

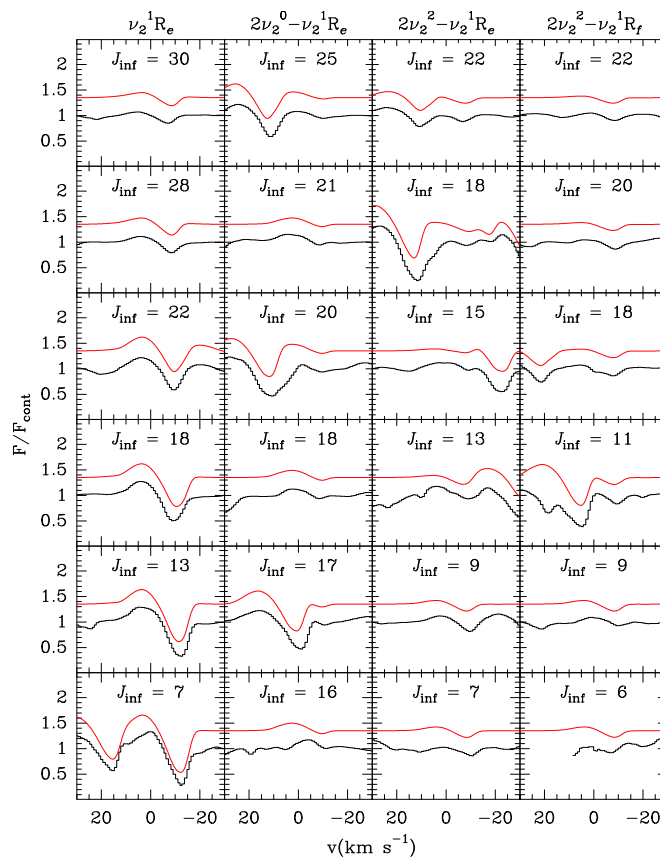


FIGURA 4.15.— Ajustes de algunas líneas de HCN. Los histogramas negros representan los espectros observados mientras que las curvas rojas representan los resultados del modelo. Los datos han sido corregidos de las desviaciones observacionales en frecuencias añadiendo o suprimiendo la diferencia media entre las frecuencias de laboratorio y las observacionales para muchas líneas. Las discrepancias existentes son pequeñas y pueden ser asumidas como solapamientos con otras líneas y/o errores observacionales (la notación espectroscópica está descrita en el Capítulo 2).

El número de líneas utilizado para los ajustes está indicado en la Tabla 4.1. La información sobre las frecuencias, intensidades y nomenclatura del HCN e isotopómeros puede ser

TABLA 4.5.— Temperaturas vibracionales del HCN y H¹³CN

Nivel vib.	P_i	T_1 (K)	α_1	T_2 (K)	α_2	T_3 (K)	α_3
G.S.	P_0	2330	0.58	900	1.56	130	1.00
$\nu_2(\pi)$	P_1	1250	0.82	600	0.62	250	1.00
$2\nu_2(\sigma^+)$	P_2	800	1.26	100	1.24	17.5	1.00
T_K	—	2330	0.58	900	0.58	400	1.00

El significado de las constantes se puede encontrar en la Tabla 4.3. Los parámetros de las temperaturas vibracionales del H¹³CN son sólo aquellos relacionados con el nivel fundamental.

encontrada en el Capítulo 2.

A partir de ahora y a no ser que indique específicamente, cuando hablemos del HCN también lo estaremos haciendo del H¹³CN, debido a la gran similitud entre ambas moléculas.

4.6.1. Temperaturas vibracionales

Como vimos en las secciones precedentes, el C₂H₂ no tiene momento dipolar eléctrico permanente (es muy pequeño para el H¹³CCH y puede ser despreciado en primera aproximación), y el hecho de considerar las poblaciones rotacionales en ETL inicialmente es una buena aproximación: no hay emisión rotacional pura. Pero este hecho, que resulta de gran ayuda en el caso del C₂H₂, puede ser una fuente de problemas para el HCN. Afortunadamente, a pesar de tener un momento dipolar permanente, el HCN parece estar en ETL para los niveles rotacionales con J pequeño, haciendo relativamente sencilla la determinación de la abundancia y las T_{vib} (ver Sección 4.6.2), que son las mismas que las T_{ev} para las transiciones observadas.

Cerca de R_{d1}, $T_d \simeq 800 - 850$ K y la emisión del polvo tiene su máximo a $\simeq 3.5 \mu\text{m}$ ($\simeq 2850 \text{ cm}^{-1}$). Esta radiación bombea HCN desde el estado fundamental hasta los niveles de tensión y de combinación $\nu_3(\sigma^+)$, $\nu_2 + \nu_3(\pi)$ y $\nu_1(\sigma^+)$, con energías 2096.85, 2807.05 y 3311.48 cm^{-1} , respectivamente (ver Figura 2.5). Además, algunos niveles rotacionales de $4\nu_2(\sigma^+)$ (con una energía de 2802.96 cm^{-1}) están intensamente conectados con el nivel fundamental a través de una resonancia existente con los niveles rotacionales correspondientes del estado vibracional $\nu_2 + \nu_3(\pi)$. Esta resonancia podría explicar el máser de HCN observado por [Schilke & Menten \(2003\)](#) en el estado $4\nu_2(\sigma^+)$. La desexcitación radiativa desde los anteriores estados vibracionales de combinación cambia la población del modo $\nu_2(\pi)$ y sus sobretonos con respecto al caso en ETL.

Las temperaturas vibracionales obtenidas a partir de los ajustes se presentan en la Tabla 4.5 y están dibujadas en la Figura 4.16. Como en el caso del C₂H₂, hemos etiquetado las poblaciones de los niveles como sigue: $P_0 \equiv P[\text{G.S.}(\sigma^+)]$, $P_1 \equiv P[\nu_2(\pi)]$, $P_2 \equiv P[2\nu_2(\sigma^+)]$ y $P_3 \equiv P[2\nu_2(\delta)]$.

- $T_{\text{vib}}[\nu_2(\pi) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma^+)] \simeq T_K$ en la Región I, apartándose de T_K en las Regiones II y III. En la Región I, las colisiones termalizan el estado $\nu_2(\pi)$, mientras que a distancias mayores sólo los fotones infrarrojos desempeñan un papel importante en el bombeo. Los niveles vibracionales $\nu_1(\sigma^+)$ y $\nu_3(\sigma^+)$ están radiativamente conectados con el estado $\nu_2(\pi)$. Además, $\nu_2(\pi)$ puede también poblarse a través del ciclo $\text{G.S.}(\sigma^+) \rightarrow \nu_2 + \nu_3(\pi) \rightarrow \nu_3(\sigma^+) \rightarrow \nu_2(\pi)$. La banda $\nu_2(\pi) - \text{G.S.}(\sigma^+)$ es bastante intensa y el ritmo de desexcitación es grande.
- $2\nu_2(\sigma^+)$ y $2\nu_2(\delta)$ están fuera de ETL en toda la CSE, incluso cerca de la superficie estelar. El momento dipolar de las transiciones que incluyen estos estados es lo suficientemente grande como para no poder llegar a termalizarse ni siquiera en una

región tan caliente y densa como la zona más interna de la CSE. Modificando la T_{vib} de estos niveles en la superficie estelar desde 1250 K a 2330 K se produce un cambio de un 20 – 30 % en el máximo de emisión de las transiciones rovibracionales de la banda $2\nu_2(\sigma^+) \leftrightarrow \nu_2(\pi)$. Así pues, nuestros datos son sensibles al valor de T_{vib} . $2\nu_2(\sigma^+)$ puede ser bombeado desde el nivel fundamental y desde $\nu_2 + \nu_3(\sigma^+)$. Sin embargo, el nivel $2\nu_2(\delta)$ no está conectado con el nivel fundamental excepto a través de cascadas radiativas desde niveles de mayor energía (ver Cernicharo et al., 1999). Es decir, $P_3/2P_2$ es siempre menor que $2P_2/P_1$.

- $T_{\text{vib}}[\nu_2 - \text{G.S.}]$ y $T_{\text{vib}}[2\nu_2 - \nu_2]$ son iguales a $\simeq 10 R_*$ (ver Figura 4.16). En las regiones externas a aquélla donde el polvo emite radiación en el infrarrojo cercano, el bombeo a través de los estados de gran energía desde el nivel fundamental (a través de radiación de $7 \mu\text{m}$, que es la longitud de onda correspondiente al máximo de emisión de un cuerpo negro a una temperatura de $T_{\text{bb}} \simeq 400 \text{ K}$) se hace importante; la población del nivel $2\nu_2(\sigma^+)$ aumenta con respecto al $\nu_2(\pi)$.

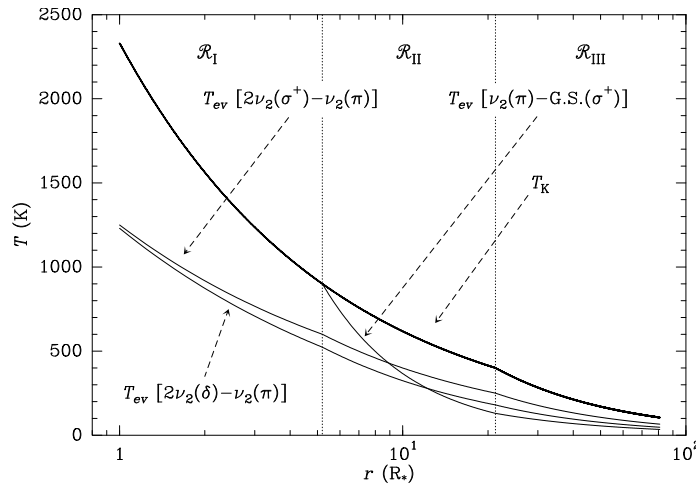


FIGURA 4.16.— Temperaturas cinética y de excitación vibracional para las transiciones observadas del HCN. Ver texto para los comentarios sobre esta Figura.

4.6.2. Temperaturas rotacionales

La estructura rotacional del estado fundamental parece estar en ETL hasta el nivel con $J \simeq 20$. Para ajustar las líneas de la banda $\nu_2 R_e$ nos es necesario utilizar T_{rot} *ad hoc* para los niveles $J = 20$ y 24 (ver Tabla 4.2). La línea $\nu_2(\pi) - \text{G.S.}(\sigma^+) R_e(21)$ se puede ajustar con más precisión utilizando una T_{rot} *ad hoc* en $r = R_{d2}$ para el nivel $J = 20$ (aunque el ajuste es relativamente bueno en ETL). Sin embargo, esta temperatura rotacional *ad hoc* es necesaria para ajustar líneas rovibracionales con mayor J . Por ejemplo, $J = 24$ debe estar fuera de ETL ya que en ETL la absorción y la emisión de la línea $\nu_2(\pi) - \text{G.S.}(\sigma^+) R_e(25)$ es un 15 % y un 70 % mayores respectivamente comparadas con la línea observada. Además, el considerar que ese nivel se desvía de ETL con la misma dependencia con J que los niveles adyacentes no produce un buen ajuste, pues el perfil sintético presenta un 77 % más de emisión y un 6 % más de absorción que el mejor ajuste. La utilización de una temperatura rotacional *ad hoc* en el nivel $J = 24$ mejora sensiblemente los ajustes de todas las líneas de mayor energía. Los ajustes sugieren la existencia de una desviación de ETL cuadrática con J para la estructura rotacional del estado vibracional fundamental, comenzando en $J = 20$ y con un decrecimiento por nivel rotacional de $96 - 7.8(J - 20) \text{ K}$ en $r = R_{d1}$ y de $46 - 3.2(J - 20) \text{ K}$ en $r = R_{d2}$.

A partir de los ajustes de las líneas de las bandas $\nu_2(\pi)$ –G.S.(σ^+) y $2\nu_2(\sigma^+) - \nu_2(\pi)$, podemos asumir que todos los niveles rotacionales del estado $\nu_2(\pi)$ están en ETL hasta $J = 22$, desviándose suavemente los niveles de mayor energía. La temperatura rotacional *ad hoc* que más se separa de la temperatura cinética es la del nivel $J = 25$, siendo necesaria para ajustar las líneas de mayor energía. Se puede asumir que los niveles rotacionales del estado $2\nu_2(\sigma^+)$ están en ETL si $J \leq 26$, pero es necesario añadir una temperatura rotacional *ad hoc* en $J = 27$. Por otro lado, los ajustes de las líneas de la banda $2\nu_2(\delta) - \nu_2(\pi)$ también requieren temperaturas *anómalas* en la fotosfera estelar, R_{d1} y R_{d2} en los niveles $J = 12$ y 26 . El mejor ajuste a todas las líneas de esta banda requiere que $T_{\text{rot}}(R_{d2}) \leq 50$ K, aunque otras temperaturas por debajo de 100 K producen ajustes peores aunque aceptables.

4.6.3. Abundancias

Las líneas de la banda $\nu_2(\pi)$ –G.S.(σ^+) del HCN con J pequeño son ópticamente opacas debido al gran momento dipolar de la transición vibracional. Muchas líneas están saturadas y se puede obtener poca información de ellas. En particular, la abundancia es un parámetro que no puede ser determinado con precisión a partir de ajustes de líneas del HCN poco energéticas. La intensidad de las líneas rotacionales puras del estado vibracional fundamental están directamente relacionadas con la abundancia de HCN mientras que, desafortunadamente, la intensidad de las líneas rovibracionales depende además de T_{vib} que es inicialmente desconocida. La falta de observaciones en radio limitadas a estas regiones impide una determinación precisa de la abundancia de HCN. Por lo tanto, es mejor estimar la abundancia de H^{13}CN ajustando las líneas ópticamente transparentes de la banda $\nu_2(\pi)$ –G.S.(σ^+) y usando la razón $[\text{H}^{12}\text{C}]/[\text{H}^{13}\text{C}] \simeq 41$ obtenida anteriormente para determinar la abundancia de HCN. Los valores que producen los mejores ajustes son:

$$x_{\text{HCN}}(r) = \begin{cases} 1.23 \times 10^{-5} & \text{Región I} \\ 4.51 \times 10^{-5} & \text{Región II} \\ 2.05 \times 10^{-5} & \text{Región III} \end{cases} \quad (4.5)$$

lo que significa que la densidad de columna del HCN es $1.6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2}$, similar a la del C_2H_2 . De hecho, parece que el HCN es más abundante que el C_2H_2 en la Región I, donde se encuentra la mayor densidad de gas. Al igual que en el caso del C_2H_2 , la abundancia interna está determinada con poca precisión (ver Sección 4.7) y las abundancias para las Regiones II y III son compatibles con las que se pueden encontrar en la literatura (Keady & Ridgway, 1993; Cernicharo et al., 1999, 1996b; Wiedemann et al., 1991; Dayal & Bieging, 1995; Lindqvist et al., 2000). El incremento de la abundancia de HCN entre las Regiones I y II es sólo de un factor 3.7 mientras que para el acetileno es de un orden de magnitud, siendo incompatible en este caso con las predicciones de los modelos químicos en ETL (M. Agúndez, comunicación privada) y de los modelos de estrellas pulsantes fuera de ETL (Cherchneff, 2006) donde se encuentra que la abundancia de HCN decrece con la distancia (véase la discusión sobre el tema en la Sección 4.7). El decrecimiento de un factor 2 en la abundancia entre las Regiones II y III parece ser real (ver Tabla 4.6).

En la Figura 4.17 se representan todas las magnitudes físicas de la envoltura representadas en una misma gráfica.

4.7. Sensibilidad del código a diversos parámetros y discusión

Para conseguir dar una información completa sobre la CSE, es necesario estudiar el comportamiento del modelo cuando se varían los parámetros y dar las incertidumbres que este hecho implica. Para este propósito, hemos seleccionado varias líneas de todas las moléculas estudiadas en este trabajo. Cada línea es activa radiativamente en distintas regiones de la CSE. Por ejemplo, la línea de $\text{H}^{13}\text{CCH } 2\nu_5(\delta) \leftrightarrow \nu_5(\pi) R_e(7)$ se extiende hasta $22 R_*$ y

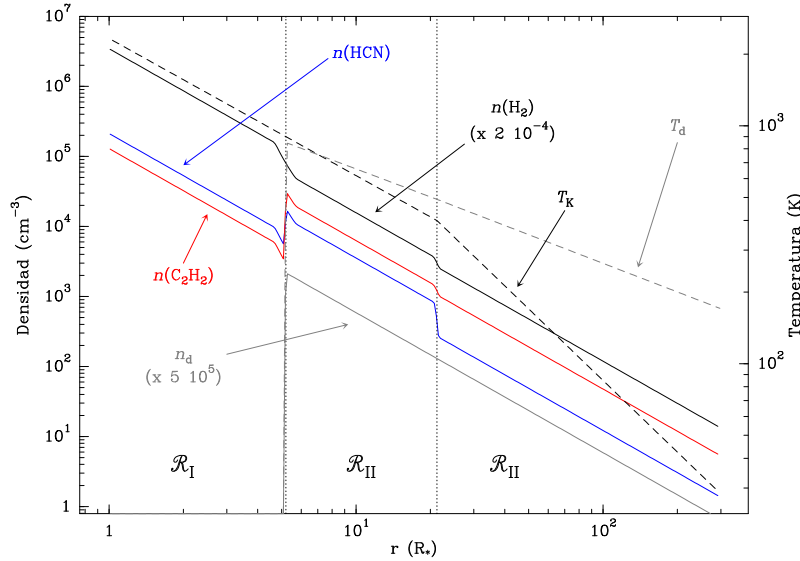


FIGURA 4.17.— Magnitudes físicas en la CSE. En la Figura están representadas las densidades y las temperaturas del gas y el polvo de la CSE, dependiendo de la distancia a la estrella. La Figura está dividida en las tres regiones que definimos anteriormente, siendo posible observar el efecto de las abundancias de las moléculas estudiadas (C_2H_2 y HCN) en cada una de las regiones. Además de las densidades de C_2H_2 y HCN hemos añadido la densidad de H_2 y la densidad de granos de polvo (multiplicadas por 2×10^{-4} y 5×10^5 , respectivamente, para permitir una buena comparación entre todos los perfiles de densidad). Por otro lado, también han sido representadas las temperaturas cinética y del polvo. A pesar de que la dependencia con r de los perfiles de densidad es del tipo r^{-2} , es posible ver los decaimientos existentes en las fronteras entre regiones debido al aumento de la velocidad de expansión. El comportamiento diferente que se observa entre las densidades de H_2 y C_2H_2 y HCN en la Región I se debe a la pequeña abundancia de estas moléculas en esa región. La diferencia entre las pendientes de T_k entre las Regiones I-II y III se debe a un cambio en el proceso de calentamiento/enfriamiento de la CSE como consecuencia de la reducción de las densidades y temperaturas del gas y del polvo. El diferente comportamiento térmico del gas y del polvo se observa claramente en las zonas externas de la CSE.

tiene una profundidad óptica de 8.50×10^{-2} en la Región I, 1.41 en la Región II y 9.94×10^{-3} en la Región III. Por otro lado, la línea del $C_2H_2 \nu_5(\pi_u) \leftrightarrow G.S.R_e(30)$ se extiende hasta $27.5 R_*$ y tiene una profundidad óptica de 3.39 en la Región I, 39.0 en la Región II y 1.35 en la Región III. La primera línea es útil para estudiar la Región II mientras que la segunda para la Región III porque son ópticamente transparentes en ellas. La Tabla 4.6 contiene los errores calculados y las líneas utilizadas para este propósito. Consideramos que las líneas elegidas (ver Tabla 4.6) son dos de las mejores para determinar los errores de los parámetros físicos. Los gradientes de velocidad introducen diferentes contribuciones espaciales en los perfiles de línea. Por lo tanto, el efecto de cada región de la CSE se hace medible a través del análisis de estas líneas. Además, una línea que es ópticamente opaca globalmente puede llevar información de algunas regiones de la envoltura. Sin embargo, hay algunos parámetros como T_{d1} y R_{d1} cuyos errores deben ser calculados ajustando el continuo porque los cambios que producen en las líneas al hacerlos variar se pueden corregir modificando otros parámetros, p.e., las temperaturas vibracionales.

Los resultados obtenidos en este trabajo están basados en varias hipótesis, la mayor parte de ellas sustentadas por datos observacionales. Sin embargo, la consideración de que las observaciones de IRC+10216 tomadas con ISO/SWS e IRTF/TEXES son compatibles (ver Sección 4.3) necesita ser discutida. Como apuntamos en la Sección 4.1, la diferencia en la fa-

TABLA 4.6.— Errores

Abundancia	Región	Valor	Parámetro	Unidad	Valor
$x(\text{C}_2\text{H}_2)$	I	$(8^{+6.4}_{-4}) \times 10^{-6}$	R_{d1}	R_*	$5.2^{+0.6}_{-0.5} i$
	II	$(8.0^{+1.2}_{-1.1} a) \times 10^{-5}$	R_{d2}	R_*	21 ± 3^b
	III	$(8.0^{+4.0}_{-2.3} b) \times 10^{-5}$	$T_K(R_{d1})$	K	$900^{+300}_{-200} e$
$x(\text{H}^{13}\text{CCH})$	I	$(3.7^{+1.6}_{-1.5} c) \times 10^{-7}$	$T_K(R_{d2})$	K	$400^{+27}_{-25} b$
	II	$(3.9^{+0.5}_{-0.4} d) \times 10^{-6}$	α_I		0.58 ± 0.16^e
	III	$(3.9^{+1.0}_{-0.9} f) \times 10^{-6}$	α_{II}		$0.58^{+0.05}_{-0.04} b$
$x(\text{HCN})$	I	$(1.2 \pm 0.4^h) \times 10^{-5}$	$T_{\text{vib}}(\nu_5 R_e, R_{d1})$	K	$175^{+22}_{-20} b$
	II	$(4.5^{+0.7}_{-0.6} h) \times 10^{-5}$	$T_{\text{vib}}(\nu_5 R_e, R_{d2})$	K	$82^{+10}_{-9} b$
	III	$(2.0^{+0.8}_{-0.6} g) \times 10^{-5}$	T_{d1}	K	850 ± 50^i
$x(\text{H}^{13}\text{CN})$	I	$(3.0^{+1.1}_{-0.9} e) \times 10^{-7}$	$v_{e,I}$	km s^{-1}	$5.0^{+1.6}_{-0.9} e$
	II	$(1.10^{+0.18}_{-0.16} e) \times 10^{-6}$	$v_{e,II}$	km s^{-1}	$11.0^{+1.5}_{-1.4} c$
	III	$(5.0^{+2.0}_{-1.5} h) \times 10^{-7}$	$v_{e,III}$	km s^{-1}	14.5 ± 0.4^c
			α_d		$0.39^{+0.08}_{-0.06} i$
			$\tau(11 \mu\text{m})$		$0.70^{+0.13}_{-0.11} i$

La Tabla muestra los parámetros obtenidos utilizando el modelo con sus errores, estimados por medio de un estudio de sensibilidad. Todos los errores dan lugar a variaciones de las líneas (o del continuo) en un intervalo de un 20 % del flujo (normalizado en el caso de las líneas) en torno al mejor ajuste. La incertidumbre de un parámetro dado se calcula comparando el espectro sintético con el observado y forzando al primero a que esté en ese intervalo, mientras que el resto de los parámetros son modificados hasta que el que estamos considerando alcanza su valor máximo/mínimo (ver Sección 3.3.15 para más información sobre el método). Algunos de los valores de la Tabla superior pueden ser algo distintos de aquéllos que aparecen a lo largo del texto, ya que estos últimos generan los mejores ajustes y la escritura de los que aparecen en la Tabla depende de los errores que los acompañan. x es la abundancia en las tres regiones en las que hemos dividido la CSE. R_{d1} y R_{d2} son las posiciones de las capas de formación de polvo interna y externa, respectivamente. La temperatura cinética, T_K , se evalúa en R_{d1} y R_{d2} . α_I y α_{II} son los exponentes de T_K en las Regiones I y II, respectivamente. $T_{\text{vib}}(\nu_5 R_e, R_{d1})$ y $T_{\text{vib}}(\nu_5 R_e, R_{d2})$ son las temperaturas vibracionales de la transición $\nu_5 - \text{G.S.} R_e$ evaluadas en R_{d1} y R_{d2} , respectivamente (se ha puesto en la Tabla como un ejemplo de los errores de T_{vib}). T_{d1} es la temperatura del polvo en R_{d1} . La velocidad de expansión del gas, v_e , se muestra en las tres regiones de la CSE. α_d es el exponente de la ley de temperaturas seguida por el polvo. Finalmente, el último parámetro es la profundidad óptica del polvo, τ , a $11 \mu\text{m}$.

A continuación se muestra un listado de las líneas utilizadas para calcular los errores de cada parámetro, con información relativa a ellas. Cada línea está acompañada por el conjunto de parámetros $P = [r_1 \%, \tau_{\text{Total}}, \tau_I, \tau_{II}, \tau_{III}]$, donde $r_1 \%$ es la distancia mínima para la cual la opacidad de la línea es $\leq 1 \%$ del máximo, τ_{Total} es la profundidad óptica total y τ_I , τ_{II} y τ_{III} son las profundidades ópticas en las Regiones I, II y III, respectivamente.

(a) $\text{C}_2\text{H}_2 \ 2\nu_5(\delta_g) \leftrightarrow \nu_5(\pi_u) R_e(30)$ con $P = [20.1, 3.57, 0.549, 2.83, 0.00664]$.

(b) $\text{C}_2\text{H}_2 \ \nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) R_e(30)$ con $P = [28.4, 42.0, 1.83, 37.2, 0.988]$.

(c) $\text{C}_2\text{H}_2 \ \nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) R_e(6)$ con $P = [206, 241, 1.60, 103.0, 127.4]$.

(d) $\text{H}^{13}\text{CCH} \ 2\nu_5(\delta) \leftrightarrow \nu_5(\pi) R_e(7)$ con $P = [22.6, 1.47, 0.0492, 1.38, 0.00660]$.

(e) $\text{H}^{13}\text{CN} \ \nu_2(\pi) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma^+) R_e(14)$ con $P = [46.4, 3.14, 0.132, 2.64, 0.234]$.

(f) $\text{H}^{13}\text{CCH} \ \nu_5(\pi) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma^+) R_e(26)$ con $P = [37.8, 2.98, 0.0629, 2.59, 0.188]$.

(g) $\text{HCN} \ \nu_2(\pi) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma^+) R_e(22)$ con $P = [32.8, 62.6, 5.16, 53.9, 1.07]$.

(h) El error absoluto de la abundancia en la Región en consideración para el isotópomo en cuestión se ha calculado con el error relativo para el otro isotópomo. Tomando la razón $[^{12}\text{C}]/[^{13}\text{C}]$ como constante a lo largo de toda la envoltura para las especies consideradas, el error relativo para ambos isotópos debe ser igual.

(i) El error se ha calculado ajustando el continuo con distintos valores del parámetro.

se IR entre ambas observaciones es aproximadamente de 0.3. Por lo tanto, las propiedades físicas de la envoltura interna son distintas para cada una de las observaciones, es decir, para el gas (IRTF/TEXES) y el polvo (ISO/SWS). Cada pulsación de la estrella es seguida por un incremento de la radiación emitida y, consecuentemente, R_{d1} y T_{d1} son incrementados por el nuevo aporte de energía proporcionado por los fotones ópticos e infrarrojos procedentes de las estrella y por el gas eyectado. En cualquier caso, la gran profundidad óptica de las capas de polvo cerca de R_{d1} disminuye el número de fotones con longitudes de onda cortas que vienen de la superficie estelar conforme la distancia a la estrella aumenta. El resto de la emisión estelar a frecuencia grandes queda bastante diluida y no afecta significativamente a la envoltura media y externa. El resultado es que sólo las capas más internas de la componente de polvo de la CSE son calentadas significativamente. Los granos de polvo cerca de R_{d1} reemiten la energía absorbida a longitudes de onda más largas,

incrementando la intensidad de radiación del continuo en el infrarrojo cercano. Como la emisión en el infrarrojo lejano y en radiofrecuencias emitida por la fuente procede principalmente de las capas de polvo externas (la emisión de cuerpo negro a $T_{bb} = 150$ K tiene su máximo a $19.3 \mu\text{m}$; la capa de polvo a esa temperatura está situada a $\simeq 450 R_*$), la pulsación estelar tiene un efecto muy pequeño en la zona de radio del continuo. No obstante, la pulsación estelar puede afectar a la contribución en el infrarrojo medio (Monnier et al., 1998). Modificando T_{d1} desde 850 a 950 K y el exponente de 0.39 a 0.42 para modelar de manera simple el incremento de T_d en las capas internas de polvo durante una pulsación estelar, el continuo cambia menos de un 15 % en el rango de frecuencias considerado en este trabajo. Cualquier variación introducida en los perfiles de línea puede ser corregida cambiando los perfiles de T_{ev} . A pesar de estos cambios, el comportamiento de T_{ev} se mantiene. El perfil de abundancia no parece estar afectado perceptiblemente por estas modificaciones en T_d . El incremento en la abundancia detectado entre las Regiones I y II parece ser real y no es un efecto de una incompatibilidad entre las observaciones de ISO/SWS y IRTF/TEXES.

La velocidad de expansión en la Región I que hemos obtenido es mayor que la sugerida por Keady et al. (1988) y Keady & Ridgway (1993) en un factor 1.75. El efecto principal producido por esta diferencia en los perfiles P-Cygni se encuentra en el ala roja de la línea (emisión), a velocidades positivas. Un incremento de la velocidad de expansión del gas en la Región I expande el ala roja del perfil P-Cygni. Una reducción de 3 km s^{-1} no mejora los ajustes. Velocidades de expansión mayores que 5 km s^{-1} parecen dar mejores resultados, aunque son improbables. Los perfiles sintéticos con 5 km s^{-1} ajustan las líneas observadas bastante bien, aunque se puede ver un exceso de emisión a velocidades cerca de la velocidad de expansión terminal en las líneas de la banda $\nu_5(\pi_u) - \text{G.S.}(\sigma_g^+)R_e$ del C_2H_2 .

Con el fin de detectar cualquier efecto producido por la diferencia entre las fases de pulsación de las observaciones de IRTF/TEXES y ISO/SWS, hemos cambiado los parámetros R_{d1} y T_d . El ala roja no sufre ninguna modificación apreciable. El hecho de que la anchura de la zona roja de los perfiles P-Cygni observados es mayor que la de las líneas sintéticas considerando la velocidad de microturbulencia aceptada, es decir, $\Delta v_1 = 5 \text{ km s}^{-1}$, sugiere que, o bien hay más emisión procedente de la parte trasera de la estrella o bien las líneas generadas cerca de la estrella tienen anchuras mayores. La primera explicación está en desacuerdo con la simetría esférica establecida por un gran número de observaciones. Por lo tanto, la segunda parece ser más realista. Una posible explicación podría ser que la Región I está formada por una estructura en capas, expandiéndose y contrayéndose y dando lugar a velocidades negativas y positivas, respectivamente (Bowen, 1988). No obstante, otro sistema que explicaría la existencia de unas anchuras de línea tan grandes en las regiones más internas de la CSE sería una envoltura formada por grumos en las inmediaciones de la estrella. Estos grumos estarían compuestos por gas caliente y se moverían de forma radial hacia la estrella y en sentido contrario a velocidades relativamente grandes. Desafortunadamente, no es posible obtener información respecto a la distribución de esos grumos en la Región I con el espectro observado por la gran dilución que sufre la radiación emitida en esta zona de la CSE. Ambos sistemas han sido utilizados por Fonfría Expósito et al. (2006) para explicar los máseres de SiS observados en esta misma fuente, donde cada pico del máser tiene anchuras de $\simeq 2 - 3 \text{ km s}^{-1}$ y permiten la deducción de una cantidad apreciable de información sobre las regiones emisoras. El modelado de estas estructuras como se indica en la Sección 4.4.2 con $\Delta v_1 = 30 \text{ km s}^{-1}$ y $\ell = 1.5 R_*$ produce perfiles sintéticos con una zona de emisión más ancha que utilizando $\Delta v_1 = 5 \text{ km s}^{-1}$, y más similar a la de las líneas observadas. Las densidades de columna obtenidas para el C_2H_2 y el HCN están promediadas por el haz principal del telescopio y sus valores reales en los grumos de la Región I podrían ser mucho mayores. En resumen, es necesaria más resolución espacial para estudiar las estructuras complejas a pequeña escala de la envoltura circunestelar interna.

La posible determinación de la condensación del acetileno en los granos de polvo en la zona externa de aceleración está de algún modo restringida por las incertidumbres en

las abundancias que hemos derivado en esta Sección. En las Regiones II y III, estas incertidumbres permiten que un 20 – 30 % del acetileno se deposite en los granos. Podemos estimar cuánto debería incrementarse el radio de los granos debido a la deposición del acetileno en ellos utilizando la densidad de esta especie y la densidad de granos de polvo en R_{d2} obtenida a partir de los ajustes ($\simeq 1200 \text{ cm}^{-3}$ y $\simeq 3 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-3}$, respectivamente), asumiendo que un 30 % del acetileno se vuelve sólido con una densidad, digamos, de $\simeq 1 \text{ g cm}^{-3}$, y considerando que los granos de polvo son esferas de radio $0.05 \mu\text{m}$. Con estas premisas calculamos que 1.2×10^6 moléculas de acetileno condensan en un sólo grano. La contribución a la masa del grano de polvo es de un 10 % y el radio del grano crece en un 3.2 %. Para radios iniciales mayores que el supuesto, el incremento es incluso menor. El pequeño incremento en el tamaño de los granos de polvo sugiere que la condensación del acetileno en ellos no contribuye significativamente a su crecimiento y que es probable que otras especies carbonadas sean las responsables de ello. Sin embargo, podría ser posible que el acetileno reaccionara con otras moléculas en la superficie de los granos dando lugar a moléculas orgánicas más complejas.

La disminución de la abundancia del HCN en R_{d2} podría ser considerada como una depleción sufrida por esta especie por deposición en los granos de polvo. En este caso, sería razonable pensar en una posible emisión o absorción en el continuo observado a longitudes de onda de entre 4 y $5 \mu\text{m}$ como consecuencia del modo de tensión del grupo $\text{C}\equiv\text{N}$ (ver por ejemplo, [Lacy et al., 1984](#); [Pendleton et al., 1999](#)). Esta modificación del espectro tomado con los instrumentos ISO/SWS no se observa aunque puede ser posible que cierta cantidad de moléculas de HCN condensen en los granos. Sin embargo, su contribución al continuo podría estar enmascarada por la banda vibracional del CO a $4.67 \mu\text{m}$. Incluso si ese fuera el caso, creemos que este posible proceso de deposición no es el principal causante del decaimiento sufrido por la abundancia de HCN en R_{d2} , estando ésta última producida por procesos químicos. El mayor decrecimiento sufrido por el HCN en toda la CSE se debe a su fotodisociación en las capas externas de la envoltura ([Agúndez & Cernicharo, 2006](#), y referencias).

4.8. Conclusiones

En este trabajo presentamos las observaciones de la fuente IRC+10216 realizadas en el rango de $11 - 14 \mu\text{m}$ con el monocromador de alta resolución espectral TEXES utilizando el telescopio de 3 m IRTF. Estos datos han sido complementados con información del continuo tomada con ISO/SWS. Hemos identificado 462 líneas rovibracionales de C_2H_2 (incluyendo niveles vibracionales con energías menores e iguales a $3\nu_5$ a $\simeq 2185 \text{ cm}^{-1}$), 95 de HCN (incluyendo niveles vibracionales hasta $2\nu_2$ con energías menores de $\simeq 1454 \text{ cm}^{-1}$), 106 de H^{13}CCH (involucrando todos los niveles vibracionales hasta $2\nu_5$ a $\simeq 1454 \text{ cm}^{-1}$) y 7 de H^{13}CN (la banda fundamental ν_2 a $\simeq 707 \text{ cm}^{-1}$). Por medio de un modelo de estrella AGB desarrollado por nosotros, hemos ajustado en torno a 300 líneas. Los resultados se pueden esquematizar como sigue:

1. La estructura geométrica y las propiedades físicas del polvo y el gas que hemos obtenido para toda la envoltura son compatibles en la mayor parte de los casos con las propuestas anteriormente. No obstante, los valores de ciertos parámetros son bastante distintos. En particular, hemos encontrado que la posición de la zona de aceleración externa está más lejos de lo propuesto por trabajos anteriores ($\simeq 21 R_* \simeq 0''.4$).
2. Las abundancias de C_2H_2 y HCN en la envoltura interna, Región I (8×10^{-6} para el C_2H_2 y 1.2×10^{-5} para el HCN con $[\text{C}^{13}]/[\text{C}^{12}] \simeq 41$) son menores que en capas más externas de la CSE, Región II (8.0×10^{-5} para el C_2H_2 y 4.5×10^{-5} para el HCN) y III (8.0×10^{-5} para el C_2H_2 y 2.0×10^{-5} para el HCN). Para el HCN, el cociente entre la abundancia en la Región II y la de la Región I es sólo de un factor $\simeq 4$, pero en el caso del C_2H_2 es de un factor $\simeq 10$. El resultado anterior está de

acuerdo con el incremento predicho por los modelos químicos, al contrario que con la abundancia de HCN, que crece con el radio mientras que los modelos sugieren un decrecimiento. Además, las abundancias determinadas en las Regiones II y III permiten la condensación de $\leq 20 - 30\%$ de moléculas de acetileno en los granos de polvo. Por otro lado, el decrecimiento de la abundancia de HCN cuando alcanza la zona de formación de polvo externa se debe probablemente a procesos químicos.

3. Las temperaturas vibracionales determinadas mediante los ajustes de líneas sugieren la existencia de un mecanismo de bombeo complejo producido por la radiación del infrarrojo cercano ($3.5 - 7 \mu\text{m}$) emitida por la estrella y el polvo existente en las capas internas de la CSE. Los niveles vibracionales de gran energía desempeñan un papel importante en el bombeo por cascadas radiativas fuera de ETL de los estados vibracionales poco energéticos y moderado en la Región II y el principio de la III. Un modelo realista que haga uso de métodos espectroscópicos de cualquier especie molecular en la envoltura interna debería introducir un análisis de los niveles vibracionales de gran energía hasta temperaturas de hasta $\simeq 3000 \text{ K}$.
4. La mayor parte de los niveles rotacionales se comportan como se espera: los niveles rotacionales con J pequeño pueden ser considerados en ETL, mientras que los de J grande no están termalizados. Hemos encontrado que es necesario añadir temperaturas rotacionales *ad hoc* para ajustar varias líneas rovibracionales. Estas T_{rot} son bastante distintas de las de los niveles adyacentes. Las transiciones rovibracionales afectadas parecen no sufrir efectos instrumentales o telúricos, así que sospechamos que estas variaciones son reales y podrían estar producidas por procesos moleculares como solapamientos con líneas de otras especies.

Los datos espectroscópicos infrarrojos nos proveen de una gran información sobre las condiciones físicas de fuentes calientes con una buena resolución espacial sin utilizar métodos interferométricos. Aún así, los procesos físicos y la química dependiente del tiempo existente en la CSE permanecen poco entendidos. Observaciones futuras de alta resolución con TEXES en el dominio del infrarrojo nos proporcionarán datos de gran calidad muy útiles para el estudio de la dinámica, química y condiciones físicas de la zona caliente y asimétrica que es la envoltura interna. Por otro lado, ALMA podrá tomar en algunos años los datos interferométricos necesarios para una aproximación más profunda a la dinámica del entorno cercano a la estrella central y a los mecanismos de formación y crecimiento de los granos de polvo.

Capítulo 5

Emisión máser de SiS en IRC+10216

A continuación presentamos la primera detección de emisión máser en las transiciones $J = 11 - 10$, $J = 14 - 13$ y $J = 15 - 14$ del estado vibracional fundamental del SiS en la estrella AGB carbonada IRC+10216.

Como ya hemos comentado anteriormente, los máseres son fenómenos radiativos bastante inusuales en el espacio y suponen que el medio está fuera del equilibrio termodinámico. Una de sus características es que suelen ser generados por regiones muy pequeñas lo que nos permite obtener información muy valiosa sobre la geometría de esas regiones emisoras y sobre sus entornos a partir del estudio de la radiación máser recibida. En la Sección 3.1.4 expusimos los métodos más comunes utilizados para conseguir invertir la población de dos niveles y obtener así la generación de radiación máser. El mecanismo de bombeo está íntimamente relacionado con las condiciones físicas del medio en el que se encuentra el gas emisor. Analizando la emisión máser observada podemos conseguir determinar cuál es el mecanismo de bombeo que produce la inversión de población e, incluso, proponer posibles máseres aún no detectados.

5.1. Observaciones

Las líneas del SiS $v = 0$ $J = 6 - 5$ y desde $J = 8 - 7$ hasta $J = 15 - 14$ (izquierda, Figura 5.1) fueron observadas el 19 de Junio del 2004 con el radiotelescopio de 30 m de IRAM. Durante esas observaciones la fase estelar fue $\phi_{\text{IR}} \simeq -0.05$ (Monnier et al., 1998). Se utilizaron simultáneamente cuatro receptores SIS operando a 3, 2, 1.3 y 1 mm. Las temperaturas de sistema fueron iguales a 120 – 225 K para los receptores a 3 y 2 mm y a 200 – 600 K para aquéllos a 1.3 y 1 mm. Las opacidades atmosféricas variaron entre 0.08 a 108 GHz y 0.2 a 272 GHz. La temperatura de sistema para la línea $J = 10 - 9$ a 181.5 GHz fue significativamente más alta, $\sim 10^4$ K, debido a la proximidad de la línea de vapor de agua a 183.3 GHz. La escala de intensidades fue calibrada usando dos cuerpos absorbentes a distinta temperatura de acuerdo al Modelo de Transmisión Atmosférica ATM (Cernicharo, 1985; Pardo et al., 2001). El apuntado y el enfoque del telescopio fueron comprobados regularmente utilizando el cuásar OJ287. Se usó el modo *wobbling* para la realización de las observaciones con un *offset* de 180'' y con el secundario nutando a una frecuencia de 0.5 Hz. Los *backends* utilizados fueron un banco de filtros con un ancho de banda de 256 MHz y una resolución de 1 MHz, y un autocorrelador con una resolución de 80 kHz ($\Delta v \simeq 0.08 - 0.2 \text{ km s}^{-1}$). Las líneas del SiS en el estado vibracional $v = 1$ (derecha, Figura 5.1), fueron observadas también con el mismo telescopio entre los años 1989 y 2001.

Además, utilizaremos algunos espectros de líneas rovibracionales del SiS (centro, Figura 5.1) de un espectro de alta resolución en el infrarrojo medio (11 – 14 μm) tomado en Diciembre del 2002 con el monocromador TEXES montado en el telescopio de 3 m IRTF. El proceso de observación se describe en la Sección 4.1 y en los trabajos de Lacy et al. (2002) y Fonfría et al. (2008).

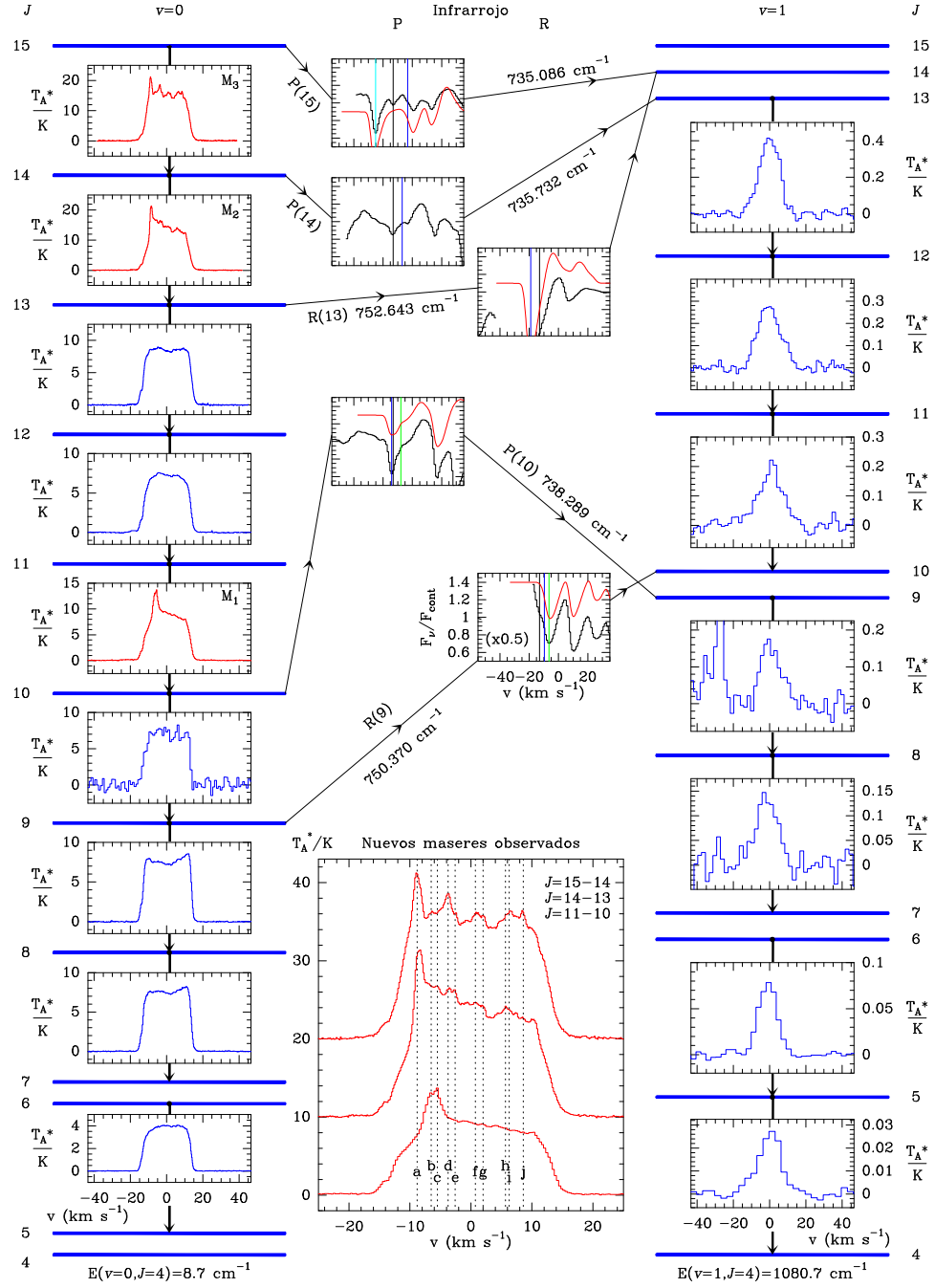


FIGURA 5.1.— Observaciones milimétricas y en el infrarrojo medio de IRC+10216. Las transiciones rotacionales puras en el estado vibracional $v = 0$ (izquierda) y en el $v = 1$ (derecha) están representadas en función de la velocidad con respecto a la de la estrella, $v_{LSR} = -26.5 \text{ km s}^{-1}$. La estructura en velocidades de los tres máseres observados, M_1 , M_2 y M_3 (paneles con histogramas rojos) se muestra en más detalle en el cuadro central inferior de la Figura. Los cuadros centrales por encima del anterior muestran algunos espectros del infrarrojo medio a las frecuencias de algunas líneas rovibracionales de la banda $v = 1 - 0$ del SiS. Las frecuencias están indicadas en cada panel. Hemos fijado el cero de la escala de velocidades en la frecuencia de las líneas de SiS corregidas por el movimiento de la fuente en el LSR. El espectro observado está dibujado en la forma de histograma negro. Las líneas rojas corresponden al modelo de transferencia de radiación desarrollado en la Sección 3.3 (Fonfría et al., 2008) que sólo considera C_2H_2 , HCN y sus isotómeros principales. La línea vertical indica la posición de la máxima absorción para las transiciones de SiS (negro), C_2H_2 (azul oscuro), $H^{13}CCH$ (azul claro) y HCN (verde).

5.2. Resultados y discusión

Las líneas rotacionales del nivel $v = 1$ presentan perfiles de tipo gaussiano y sus intensidades relativas indican que los niveles rotacionales están poblados térmicamente. Las anchuras de línea corresponden a velocidades de expansión de $9 - 11 \text{ km s}^{-1}$. Como ya hemos visto anteriormente (Figura 4.8), el perfil de velocidades de expansión está compuesto por tres regiones donde la velocidad se mantiene más o menos constante, siendo en la Región I de entre 2 y 5 km s^{-1} , en la Región II de $\simeq 11 \text{ km s}^{-1}$ y en la Región III de $\simeq 14.5 \text{ km s}^{-1}$ (Keady et al., 1988; Keady & Ridgway, 1993; Cernicharo et al., 2000; Fonfría et al., 2008). Esto nos indica que las líneas rotacionales del primer estado vibracional excitado del SiS se forman en las Regiones I y II, principalmente en la I (ver Figura 5.2). Por lo tanto, la emisión procede de la región más interna de la CSE, entre la fotosfera estelar y la capa de formación de polvo interna, situada a $\simeq 5 R_*$ (Keady & Ridgway, 1993; Fonfría et al., 2008).

Es posible calcular la abundancia de SiS en esta región utilizando las líneas del estado vibracional $v = 1$. Para ello hemos asumido una esfera uniforme con un radio de $10 R_*$, situada a una distancia de 180 pc , iluminada por una estrella central ($R_* = 5 \times 10^{13} \text{ cm}$, $T_* = 2300 \text{ K}$), con una temperatura cinética y densidad del gas de 1000 K y $1.6 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$, respectivamente. La velocidad de expansión asumida es de 11 km s^{-1} . Los valores anteriores son todos promedios para la envoltura interna obtenidos a partir de los resultados del estudio de Fonfría et al. (2008, ver Capítulo 4). Las ecuaciones de equilibrio estadístico para el SiS se han resuelto considerando 100 niveles rotacionales y 3 vibracionales. Para resolver el problema de la transferencia de radiación, hemos utilizado el formalismo LVG mediante el uso del código desarrollado por J. Cernicharo (p.e., Castor, 1970). Con la n_{H_2} asumida,

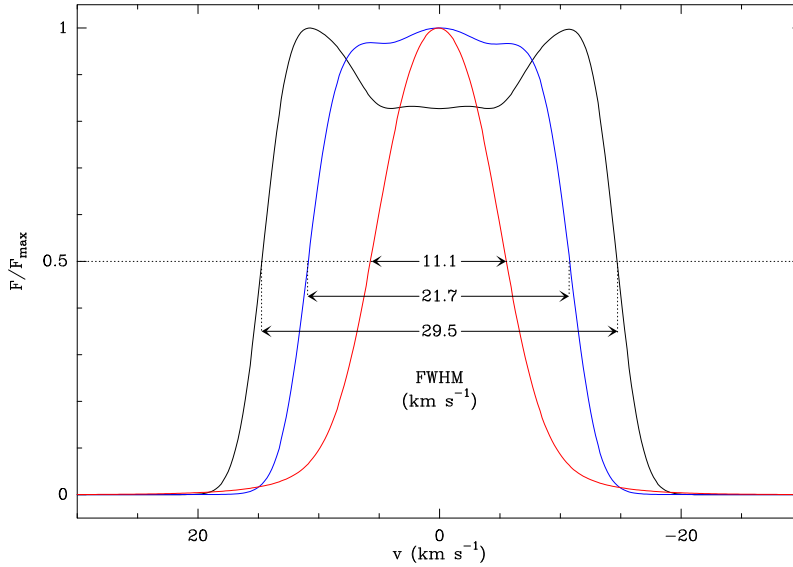


FIGURA 5.2.— Perfiles de línea del HCN en el rango milimétrico. En la Figura se representa la línea rotacional normalizada del estado fundamental del HCN $J = 3 - 2$ a 265.8864 GHz generada por diferentes regiones de la CSE de IRC+10216. Para ello, hemos utilizado todos los parámetros derivados en el Capítulo 4, calculándolo para una observación con un telescopio de 30 m (lo que supone un HPBW $\simeq 10''$) con el modelo desarrollado en el Capítulo 3.3. En negro se representa la línea producida por las Regiones I, II y III, en azul la procedente de la Región I y II, y en rojo la generada únicamente por la Región I. La forma de las líneas rotacionales del estado $v = 1$ indica que la mayor parte de la emisión procede de la Región I con pequeñas contribuciones de la Región II.

la densidad de columna de H_2 es $\simeq 7 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$ y la de $\text{SiS} \simeq 5.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$, con una abundancia de $\simeq 7 \times 10^{-6}$. Esta abundancia es compatible con un valor mayor en la zona interna de la envoltura, 3×10^{-5} , calculado con modelos de química en ETL (Agúndez & Cernicharo, 2006), y una abundancia considerablemente menor en las capas externas, 6.5×10^{-7} de acuerdo con las observaciones de líneas rotacionales del estado vibracional $v = 0$ sobre la CSE externa (Bieging & Nguyen-Q-Rieu, 1989).

La mayor parte de las líneas rotacionales en $v = 0$ muestran perfiles redondeados o con dos picos con la parte azul parcialmente absorbida por el SiS frío existente en la Región III. Sin embargo, M_1 , M_2 y M_3 muestran emisión extra en forma de picos estrechos y con una anchura de $\simeq 1 - 3 \text{ km s}^{-1}$, lo que sugiere que la emisión surge de regiones muy pequeñas. Las velocidades de estos picos aparecen en el rango de entre -10 y 10 km s^{-1} , lo que indica que la radiación máser es emitida desde diferentes regiones localizadas entre la estrella y la zona interna de formación de polvo ($r \simeq 5 R_*$), y en la zona de aceleración misma. Las líneas M_2 y M_3 fueron observadas previamente por Sahai et al. (1984) pero no detectó emisión máser. Esto puede ser debido o bien a que las observaciones no eran lo suficientemente sensibles como para detectar claramente las diferencias en intensidad observadas en cada una de las líneas máser o bien a una dependencia temporal del fenómeno máser del SiS . El cuadro inferior del centro de la Figura 5.1 muestra en detalle los perfiles de línea de los máseres observados. En él se identifican 10 picos de emisión máser nombrados de la a a la j . El perfil más complejo es el de la línea M_3 . Está formado por los picos a , d , f , i y j , que están situados a velocidades de $v = -8.8, -3.7, 0.88, 6.3$ y 8.4 km s^{-1} , respectivamente. Los perfiles de línea indican que los picos más intensos se producen a velocidades negativas, siendo aquéllos generados a velocidades positivas más débiles. Este comportamiento fue encontrado por Henkel et al. (1983) en la línea $v = 0 \ J = 1 - 0$, centrada a -13.5 km s^{-1} . La gran asimetría en la posición de los picos más externos encontrada en los perfiles de línea puede ser debida a un ocultamiento por la propia estrella de la emisión máser emitida en el rojo, o a una amplificación de la radiación máser emitida hacia el azul por el entorno de la estrella.

El máser observado más intenso, M_3 , con $T_{\text{MB}} \simeq 60 \text{ K}$ ($F_{\text{obs}} \simeq 300 \text{ Jy}$; entre las emisiones térmica y no térmica), es débil comparado con varios máseres de SiO detectados en estrellas ricas en oxígeno (Cernicharo et al., 1993) o con los máseres de HCN detectados en IRC+10216 (Lucas & Cernicharo, 1989; Schilke & Menten, 2003). Sin embargo, M_1 , M_2 y M_3 son más intensos que el máser de $\text{SiS} \ J = 1 - 0$ observado en IRC+10216 por Henkel et al. (1983). El parecido entre los picos máser en M_2 y M_3 indica que estos pueden estar generados en las mismas regiones y por el mismo mecanismo de bombeo. El máser en M_1 se forma probablemente en otras regiones distintas. Por lo tanto, sugerimos dos posibles geometrías en la zona interna de la envoltura que pueden explicar los picos observados:

1. Una envoltura interna estructurada en capas, donde cada máser se forma en una capa distinta (Figura 5.3). Esta hipótesis está respaldada por la simetría de los picos $a - j$ y $d - i$. Los picos situados a velocidades extremas, a y j , podrían ser producidos justo en frente y detrás de la estrella, cerca de la zona interna de formación de polvo ($r \simeq 5 R_*$) y con velocidades de expansión de $\simeq 5 - 11 \text{ km s}^{-1}$. Los picos d e i podrían estar producidos de una forma parecida pero en una capa más interna con una velocidad de expansión menor. Finalmente, el pico central, f , podría estar formado en una capa muy cercana a la estrella, contribuyendo toda esta capa a la emisión máser. Por otro lado, M_1 podría proceder de una región con forma de casquete en frente de la estrella (Figura 5.3, en amarillo).
2. Todos los máseres están formados en diferentes nódulos o grumos de una misma capa (Figura 5.4). Los diferentes picos en M_2 y M_3 podrían estar formados en regiones distintas de esa capa con diferentes velocidades proyectadas: los picos a y j en nódulos en frente y detrás de la estrella, y los otros picos (d , f e i) en diferentes nódulos. Una distribución diferente a la anterior sería la causante del pico de M_1 (Figura 5.4, en amarillo).

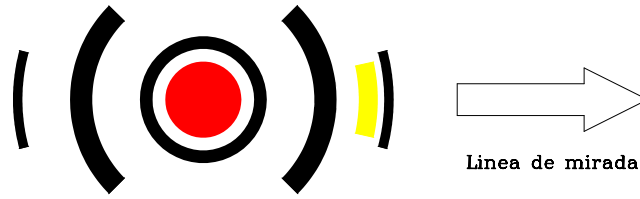


FIGURA 5.3.— Estructura de IRC+10216 en forma de capas. Cada capa o casquete representado podría ser el generador de los picos observados en los máseres. Las capas en negro se corresponden con los picos observados en los máseres M_2 y M_3 (Figura 5.1), mientras que el amarillo daría lugar al pico principal del máser M_1 .

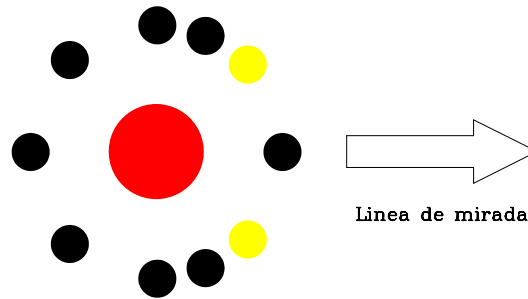


FIGURA 5.4.— Estructura de IRC+10216 en forma de nódulos. También se pueden explicar las observaciones suponiendo que la zona interna de IRC+10216 está formada por nódulos generadores de los picos observados. Los círculos negros representan las regiones creadoras de los picos observados en los máseres M_2 y M_1 mientras que los amarillos están referidos a aquel pico que se encuentra en el máser M_1 .

El mecanismo clásico de bombeo para los máseres de SiO en $v > 0$ que se observan en estrellas oxigenadas se basa en una disminución con J de la probabilidad de escape $(A/\tau)_{v \rightarrow v-1}$ para las transiciones rovibracionales $v \rightarrow v-1$, que se convierten en ópticamente opacas (Kwan & Scoville, 1974, ver Sección 3.1.4.1). Dicho mecanismo produce máseres en líneas rotacionales adyacentes del estado vibracional v , y explica los máseres con J pequeño detectados en $v = 1$ y $v = 2$ para SiO (Bujarrabal & Nguyen-Q-Rieu, 1981; Lockett & Elitzur, 1992). Sin embargo, los máseres observados en el espectro rotacional de los estados vibracionales $v = 3$ y $v = 4$ del SiO y de los isotopómeros ^{29}SiO y ^{30}SiO , no pueden ser explicados mediante este mecanismo sino que parecen ser el producto de solapamientos infrarrojos entre líneas rovibracionales de los isotopómeros del SiO (Cernicharo et al., 1991; González-Alfonso & Cernicharo, 1997). La ausencia de emisión máser en las líneas rotacionales del SiS en el estado vibracional $v = 1$ y el extraño patrón existente en el espectro rotacional de $v = 0$ también excluyen el mecanismo de bombeo propuesto por Kwan & Scoville. Además, Carlström et al. (1990) encontraron una oscilación fuera de fase en la intensidad de las líneas del SiS $v = 0$ $J = 6-5$ y $J = 5-4$. En esta última, los picos azul y rojo (ver Figura 5.2) detectados a velocidades cercanas a la velocidad de expansión terminal aparecen y desaparecen, indicando que esos picos podrían ser producidos por solapamientos que incluyan el nivel $J = 5$. Estos hechos sugieren que los solapamientos de las transiciones rovibracionales de la banda $v = 1-0$ del SiS con otras de las bandas fundamentales

ν_5 del C_2H_2 y ν_2 del HCN, pueden ser los causantes del mecanismo de bombeo. El C_2H_2 y el HCN son abundantes en la envoltura interna de IRC+10216 y dominan el espectro entre $11 - 14 \mu m$ (Fonfría et al., 2008, ver Capítulo 4). Los solapamientos con esas dos especies ya fueron propuestos por Sahai et al. (1984) para explicar los perfiles de línea tan distintos observados en transiciones rotacionales adyacentes en el espectro del SiS. Sin embargo, las frecuencias del SiS utilizadas en este trabajo no eran tan precisas ($\sigma \sim 10^{-1} \text{ cm}^{-1}$) como las disponibles hoy en día. Las frecuencias que hemos utilizado en este trabajo han sido calculadas con los coeficientes de Dunham publicados por Sanz et al. (2003). El error del centro de banda es $< 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ ($\simeq 0.04 \text{ km s}^{-1}$) mientras que la precisión relativa de las líneas de las bandas P y R es mucho mejor. Las frecuencias de las líneas de C_2H_2 , $H^{13}CCH$, HCN y $H^{13}CN$ han sido tomadas de la Base de Datos HITRAN (Rothman et al., 2005) y tienen una precisión mejor que 10^{-3} cm^{-1} ($\simeq 0.4 \text{ km s}^{-1}$) para el C_2H_2 y el $H^{13}CCH$, y 10^{-4} cm^{-1} para el HCN y el $H^{13}CN$.

La Tabla 5.1 muestra los solapamientos en el infrarrojo medio del SiS con C_2H_2 , HCN y sus isotopómeros más abundantes. Para la búsqueda de solapamientos hemos seleccionado las coincidencias con $|\Delta v| < 10 \text{ km s}^{-1}$ (la definición de Δv se puede encontrar en los comentarios de la Tabla 5.1). La razón de elegir un límite superior de 10 km s^{-1} es que la interacción radiativa existente entre las regiones de la envoltura con velocidades lo suficientemente distintas como para que $|\Delta v| > 10 \text{ km s}^{-1}$ es probable que dé lugar a una inversión de población poco intensa (o que no genere inversión de población) a causa del desplazamiento Doppler producido por el movimiento relativo. No debemos olvidar que la envoltura se expande y, por ello, cada región recede con respecto a las otras. Por lo tanto, si la población de los niveles del SiS es afectada por un solapamiento con una línea intensa de otra especie molecular, la frecuencia de esta otra línea debe ser mayor que la del SiS. Este hecho restringe la condición a Δv no negativas. Por otro lado, debido a sus anchuras, las líneas con $\Delta v < 0$ pueden solapar con las líneas del SiS. Por lo tanto, hemos puesto el límite negativo en la mitad de una anchura de línea típica en la zona interna de la envoltura ($\simeq 5 \text{ km s}^{-1}$; Keady et al. 1988; Keady & Ridgway 1993). Por lo tanto, nuestra búsqueda queda restringida a $-2.5 \leq \Delta v \leq 10 \text{ km s}^{-1}$.

El hecho de haber elegido 5 km s^{-1} como la anchura estándar de una línea en la región interna de la CSE teniendo en cuenta que, según lo expuesto en el Capítulo 4 las anchuras de línea en la Región I pueden ser varias veces mayores que 5 km s^{-1} , se corresponde principalmente con la adopción de una postura conservadora. La existencia de anchuras de línea en la zona más interna de la región I de $\simeq 30 \text{ km s}^{-1}$ es una sugerencia que conviene estudiar en más profundidad mientras que es ampliamente aceptado que las anchuras de línea cerca de la fotosfera estelar son al menos de 5 km s^{-1} . No obstante, existe un segundo razonamiento que apoya nuestra elección. El flujo integrado en frecuencias de cada línea generada en la Región I prácticamente no varió en el trabajo presentado en el Capítulo 4 al pasar de considerar anchuras de línea de $\simeq 5 \text{ km s}^{-1}$ a $\simeq 30 \text{ km s}^{-1}$. Por lo tanto, al aumentar la anchura de estas líneas, disminuyó la intensidad de la radiación emitida a cada frecuencia. Este hecho, junto con la consideración de que las líneas con anchura $\simeq 30 \text{ km s}^{-1}$ deberían estar generadas muy cerca de la fotosfera ($r \lesssim 1.5 R_*$), supone que éstas afectarían a más regiones de la CSE pero de manera menos intensa no dando lugar al proceso de inversión de poblaciones.

Con el fin de interpretar cualitativamente los efectos de los solapamientos infrarrojos en la emisión máser, vamos a usar el mismo código de transferencia radiativa LVG que anteriormente, pero modificado para tener en cuenta los solapamientos, permitiendo variar la intensidad de radiación existente a la frecuencia del solapamiento y la *probabilidad de escape*¹ para los fotones de las transiciones solapadas. Así, para algunas líneas del SiS, la temperatura de excitación se hace negativa (activación máser) y la temperatura de brillo aumenta con-

¹Se define la *probabilidad de escape* de un fotón con frecuencia ν , β_ν , como la probabilidad de que ese fotón emitido en una región determinada de una nube molecular escape de ella sin ser reabsorbido, es decir, $\beta_\nu = e^{-\tau_\nu}$ donde τ_ν es la profundidad óptica del material existente a lo largo de la trayectoria del fotón. Cuando $\tau_\nu \ll 1$, se cumple que $\beta_\nu \simeq \tau_\nu$.

TABLA 5.1.— Solapamientos en el infrarrojo medio del SiS con C₂H₂, HCN y sus isotopómeros más abundantes

Línea del SiS	$\nu(\text{cm}^{-1})$	Molécula	Transición	Δv (km s ⁻¹)
Solapamientos que incluyen niveles del SiS pertenecientes a líneas del espectro rotacional puro observadas				
R 9	750.3695	HCN	$\nu_2(\pi) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma^+) \text{R}_e$ (12)	-6.6
P10	738.2889	C ₂ H ₂	$\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-) \leftrightarrow \nu_4(\pi_g) \text{R}_f$ (3)	1.2
R13	752.6431	C ₂ H ₂	$\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{R}_e$ (9)	5.9
P14	735.7324	C ₂ H ₂	$\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{Q}_e$ (38)	-6.1
P15	735.0861	C ₂ H ₂	$\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{Q}_e$ (36)	-9.9
Solapamientos que incluyen niveles del SiS pertenecientes a líneas del espectro rotacional puro no observadas				
P 2	743.2624	C ₂ H ₂	$\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{R}_e$ (5)	0.6
P16	734.4368	C ₂ H ₂	$\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{Q}_e$ (34)	1.1
P20	731.8114	C ₂ H ₂	$\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{Q}_e$ (24)	9.5
P22	730.4815	C ₂ H ₂	$\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-) \leftrightarrow \nu_4(\pi_g) \text{Q}_e$ (18)	-2.1
R22	757.5819	C ₂ H ₂	$\nu_4 + \nu_5(\delta_u) \leftrightarrow \nu_4(\pi_g) \text{R}_e$ (10)	0.1
R22	757.5819	H ¹³ CN	$\nu_2(\pi) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma^+) \text{R}_e$ (17)	5.2
P23	729.8123	H ¹³ CCH	$\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{Q}_e$ (19)	8.7
P24	729.1402	C ₂ H ₂	$\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{Q}_e$ (1)	9.4
P25	728.4654	H ¹³ CCH	$\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{Q}_e$ (7)	-0.0
R25	759.1733	HCN	$\nu_2(\pi) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma^+) \text{R}_e$ (15)	3.6
R26	759.6977	C ₂ H ₂	$\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{R}_e$ (12)	-1.0
R33	763.2816	H ¹³ CN	$\nu_2(\pi) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma^+) \text{R}_e$ (19)	6.1
P38	719.4363	C ₂ H ₂	$\nu_4 + \nu_5(\delta_u) \leftrightarrow \nu_4(\pi_g) \text{P}_e$ (5)	4.5
R40	766.7130	C ₂ H ₂	$\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{R}_e$ (15)	4.3
R42	767.6652	C ₂ H ₂	$\nu_4 + \nu_5(\sigma_u^+) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{R}_e$ (20)	8.7
R45	769.0697	C ₂ H ₂	$\nu_5(\pi_u) \leftrightarrow \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{R}_e$ (16)	-1.8
P48	712.1720	C ₂ H ₂	$\nu_4 + \nu_5(\delta_u) \leftrightarrow \nu_4(\pi_g) \text{P}_f$ (8)	4.7

La Tabla muestra los solapamientos en frecuencia de las líneas de SiS con C₂H₂, H¹³CCH, HCN y H¹³CN encontrados en el rango del infrarrojo medio [690, 780] cm⁻¹ con $-2.5 \leq \Delta v \leq 10$ km s⁻¹, donde $\Delta v/c = [\nu(X) - \nu(\text{SiS})]/\nu(\text{SiS})$, las frecuencias de las líneas de la especie X presentan efecto Doppler con respecto a la región emisora de radiación máser del SiS por el movimiento relativo de ambas regiones (ver el texto para más detalles). Hemos considerado sólo las líneas con $J \leq 50$, correspondientes a todas las transiciones del SiS por debajo de 900 GHz. Las líneas y frecuencias de la izquierda corresponden a las líneas del SiS de la banda $v = 1 - 0$. Los errores en las velocidades son < 0.5 km s⁻¹. La notación para las transiciones de todas las especies moleculares puede verse en la Sección 2.

siderablemente (ver Sección 3.1.2). M₂ y M₃ pueden ser explicados naturalmente mediante el solapamiento de la línea del SiS R(13)² con la línea del C₂H₂ $\nu_5(\pi_u) - \text{G.S.}(\sigma_g^+) \text{R}_e$ (9) (Tabla 5.1). Las moléculas del SiS son excitadas fácilmente desde $v = 0$ $J = 13$ hasta $v = 1$ $J = 14$ a través de la transición rovibracional R(13) y decaen a $v = 0$ $J = 15$ vía P(15), dando lugar a la inversión de población entre los niveles $v = 0$ $J = 13$ y $J = 15$ y produciendo la emisión máser en M₂ y M₃ (Figura 5.5).

²Todas las líneas rovibracionales del SiS que comentemos a partir de ahora se refieren a transiciones rovibracionales con $v = 1 - 0$ y serán nombradas con la nomenclatura espectroscópica usual R, Q y P (ver Sección 2).

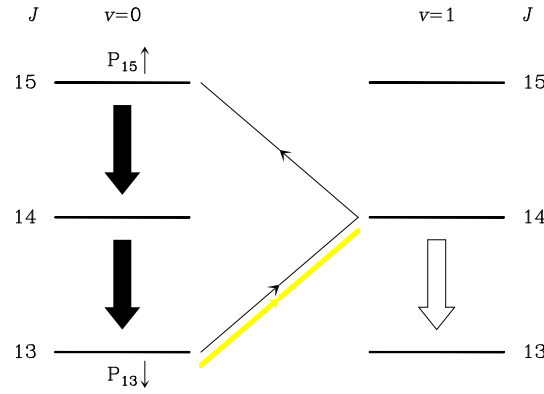


FIGURA 5.5.– Mecanismo de bombeo para los máseres M_2 y M_3 . El solapamiento entre las líneas SiS R(13) y $C_2H_2 \nu_5(\pi_u) - G.S.(\sigma_g^+) R_e(9)$ aumenta significativamente la población en el nivel $v = 0$ $J = 15$ reduciendo a su vez la población del nivel $v = 0$ $J = 13$. De este modo es posible la aparición de los máseres M_2 y M_3 . Durante el proceso también aumenta la población del nivel $v = 1$ $J = 14$, que podría generar un máser no observado en la transición $v = 1$ $J = 14 - 13$.

El proceso de generación de los máseres M_2 y M_3 podrían dar lugar a un máser asociado a la transición $v = 1$ $J = 14 - 13$, debido al incremento de la población del nivel $v = 1$ $J = 14$ a consecuencia del solapamiento. Hasta el momento no existen observaciones relativas a esa línea.

M_1 puede ser producido por el solapamiento de la línea del SiS P(10) con la línea intensa del $C_2H_2 \nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-) - \nu_4(\pi_g) R_f(3)$. Este solapamiento puede bombear moléculas de SiS desde $v = 0$ $J = 10$ hasta $v = 1$ $J = 9$ a través de P(10), reduciendo así la población del nivel $v = 0$ $J = 10$ y produciéndose la inversión entre $v = 0$ $J = 10$ y $J = 11$ (Figura 5.6).

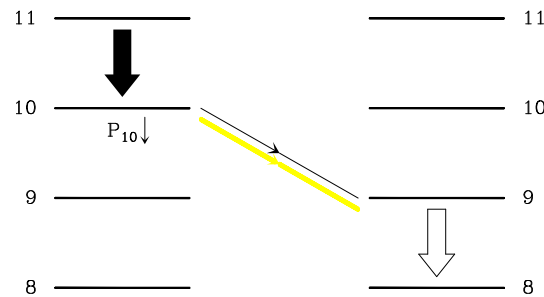


FIGURA 5.6.– Mecanismo de bombeo para los máseres M_1 . En este caso, el solapamiento entre las líneas SiS R(10) y $C_2H_2 \nu_4 + \nu_5(\sigma_u^-) - \nu_4(\pi_g) R_f(3)$ reduce la población del nivel $v = 0$ $J = 10$ dando lugar al máser M_1 . El incremento de población sufrido en el proceso por el nivel $v = 1$ $J = 9$ podría dar lugar a un máser asociado a la transición $v = 1$ $J = 9 - 8$, que no se observa (ver Figura 5.1). Ver el texto para más detalles.

Al igual que para el caso de los máseres M_2 y M_3 , el proceso de solapamiento podría incrementar significativamente la población del nivel $v = 1$ $J = 9$ y generar un máser asociado a la transición $v = 1$ $J = 9 - 8$. A pesar de que esta línea ha sido observada (ver Figura 5.1), no se detecta ningún tipo de emisión máser. Este hecho podría deberse a falta de resolución espectral o a la variabilidad temporal del mecanismo de bombeo, tomando el propuesto como válido. Las líneas rotacionales del estado vibracional $v = 0$ fueron tomadas en el año 2004 mientras que las del estado $v = 1$ se tomaron en el periodo comprendido entre los años 1989 y 2001 (ver Sección 5.1). Este desfase temporal podría producir esta supuesta incompatibilidad entre nuestras observaciones y el mecanismo propuesto para explicarlas.

También hemos buscado solapamientos de transiciones rovibracionales de SiS con $16 \leq J \leq 70$ en la banda $v = 1 - 0$ con otras de C_2H_2 y HCN para intentar predecir máseres en el rango del submilimétrico. Algunos de ellos se muestran en el segundo bloque de la Tabla 5.1. Estos solapamientos sugieren, por ejemplo, que se podría producir un máser en aquellas transiciones rotacionales que incluyeran el nivel $v = 0$ $J = 23$ (probablemente $J = 24 - 23$ y tal vez $J = 23 - 22$ a 435.3878 y 417.2724 GHz, respectivamente), o los estados $v = 0$ $J = 25$ y $J = 26$ (quizás en $v = 0$ $J = 27 - 26$ y tal vez $J = 26 - 25$, a 489.7127 y 471.6080 GHz). Estos solapamientos podrían también producir máseres en varias transiciones rotacionales del estado vibracional $v = 1$.

Actualmente, existen telescopios adecuados para la detección de las líneas anteriores: CSO, JCMT y APEX, principalmente. El único que podría permitir la observación de las 4 líneas sería el CSO, con un rango de observación de 375 – 510 GHz y una temperatura de sistema de $\simeq 200$ K. Tanto el JCMT como APEX, con los receptores RxW y FLASH respectivamente (con una temperatura de sistema de $\simeq 200$ y $\simeq 300$ K), nos permitirían observar las líneas con frecuencias por encima de 430 GHz, es decir, $J = 27 - 26$, $J = 26 - 25$ y $J = 24 - 23$. La instalación en un futuro cercano del receptor heterodino APEX-3 en APEX, permitirá también la observación de la línea $J = 23 - 22$, ya que su rango de observación será similar al actual del CSO.

Hay muchos solapamientos de otros isotopómeros del SiS con líneas de C_2H_2 , HCN y $^{28}Si^{32}S$. Con los criterios adoptados para la búsqueda de solapamientos (ver nota de la Tabla 5.1), hemos encontrado 91, 93, 76 y 94 coincidencias para ^{29}SiS , ^{30}SiS , $Si^{34}S$ y $Si^{33}S$, respectivamente. En consecuencia, aunque estas especies son menos abundantes que $^{28}Si^{32}S$, las poblaciones de algunos niveles podrían estar invertidas produciendo emisión máser.

Este estudio representa el descubrimiento de tres nuevos máseres de SiS y debería estar complementado con futuras observaciones de niveles rotacionales de los estados vibracionales del SiS $v = 0$ y $v = 1$ en el rango del submilimétrico. Además, como hemos visto en este Capítulo, los máseres de SiS parecen estar formados en zonas muy pequeñas en la región más próxima a la estrella central de IRC+10216, con una anchura de $\simeq 0''.2$. La envoltura interna es, por lo tanto, un objetivo perfecto para la utilización del interferómetro ALMA, con el que se pueden alcanzar resoluciones angulares de ~ 10 mas en el rango del submilimétrico. La observación de IRC+10216 utilizando dicha resolución nos dará los datos necesarios para establecer la verdadera geometría de la región emisora de radiación máser con gran precisión. Combinando los datos derivados de estos trabajos con los obtenidos de estudios de la zona interna de la CSE, como el presentado en el Capítulo 4, y la utilización de un modelo de transferencia radiativa detallado multimolecular y no local será posible avanzar de manera importante en la comprensión de los fenómenos generadores de la eyección de la materia por las estrellas AGB y su posterior aceleración, y en el papel desempeñado por el SiS en las estrellas AGB carbonadas.

Capítulo 6

La abundancia de los poliínos C_4H_2 , C_6H_2 y C_8H_2 en CRL618

Con el estudio realizado sobre la envoltura circunestelar de IRC+10216 hemos tratado de contribuir a la comprensión de la zona más interna de esta estrella AGB rica en carbono que puede considerarse como prototípica. El conocer bien la evolución estelar durante esta fase es crucial, pero no lo es menos el averiguar qué es lo que ocurre durante la evolución entre las fases AGB y PN (ver Secciones 1.1.1 y 1.1.7), periodo en el que se eyecta al medio interestelar aproximadamente la mitad de la masa de la estrella.

La eyección de tal cantidad de materia en tan poco tiempo característica de esta etapa, supone un reto en el estudio de la evolución estelar por la dificultad de conocer los fenómenos físicos responsables de este proceso. Es por ello que las observaciones moleculares del gas eyectado nos pueden ser de gran utilidad al proporcionarnos información sobre las características físicas del entorno cercano a los restos de la antigua estrella. Como ya hemos visto en el caso de IRC+10216, las observaciones infrarrojas son muy valiosas en el estudio del gas caliente y templado. La aplicación de los métodos para el tratamiento de datos espectroscópicos en el infrarrojo puede proporcionarnos una cantidad apreciable de información sobre el gas que rodea la región HII de CRL618.

En este Capítulo estudiaremos dos conjuntos de datos de gran resolución espectral a 8 y 13 μm tomados con el espectrómetro TEXES instalado en el telescopio IRTF. En ellos, encontraremos las bandas $\nu_6 + \nu_8(\sigma_u^+)$ del C_4H_2 y $\nu_8 + \nu_{11}(\sigma_u^+)$ del C_6H_2 , además de varias líneas de las bandas $\nu_5(\pi_u)$ y $\nu_2(\pi)$ del C_2H_2 y del HCN, respectivamente. Utilizando estos datos podremos obtener información sobre las densidades de columna de estas especies y sobre la estructura y propiedades físicas de la región interna de la envoltura circunestelar, muy cerca de la región HII que ocupa el centro de la PPN CRL618 (Fonfría et al., 2009).

6.1. Observaciones

El presente trabajo está basado en las observaciones de CRL618 realizadas, como en el caso de IRC+10216, con el monocromador TEXES (Lacy et al., 2002) acoplado al telescopio de 3 m IRTF en Hawaii, durante la primera mitad de las noches de los días 12 de Diciembre del 2002 y 8 de Enero del 2004. En ambas observaciones se utilizó TEXES en el modo de gran resolución espectral con un poder de resolución $R \simeq 10^5$ y 6 configuraciones separadas para cubrir los rangos $778 - 784$ y $1215 - 1250 \text{ cm}^{-1}$ (12/12/2002), y $1205 - 1250 \text{ cm}^{-1}$ (08/01/2004). Al ser la separación temporal de algo más de 1 año, hemos supuesto que no ha habido variación perceptible en la fuente y hemos combinado los datos a fin de conseguir un conjunto lo más extenso y completo posible. Por lo tanto, en este trabajo utilizaremos los rangos $778 - 784 \text{ cm}^{-1}$ (12/12/2002) y $1205 - 1250 \text{ cm}^{-1}$ (08/01/2004; ver Figura 6.1).

Para cada configuración, y antes de cambiar a la siguiente, se observó el Objeto de

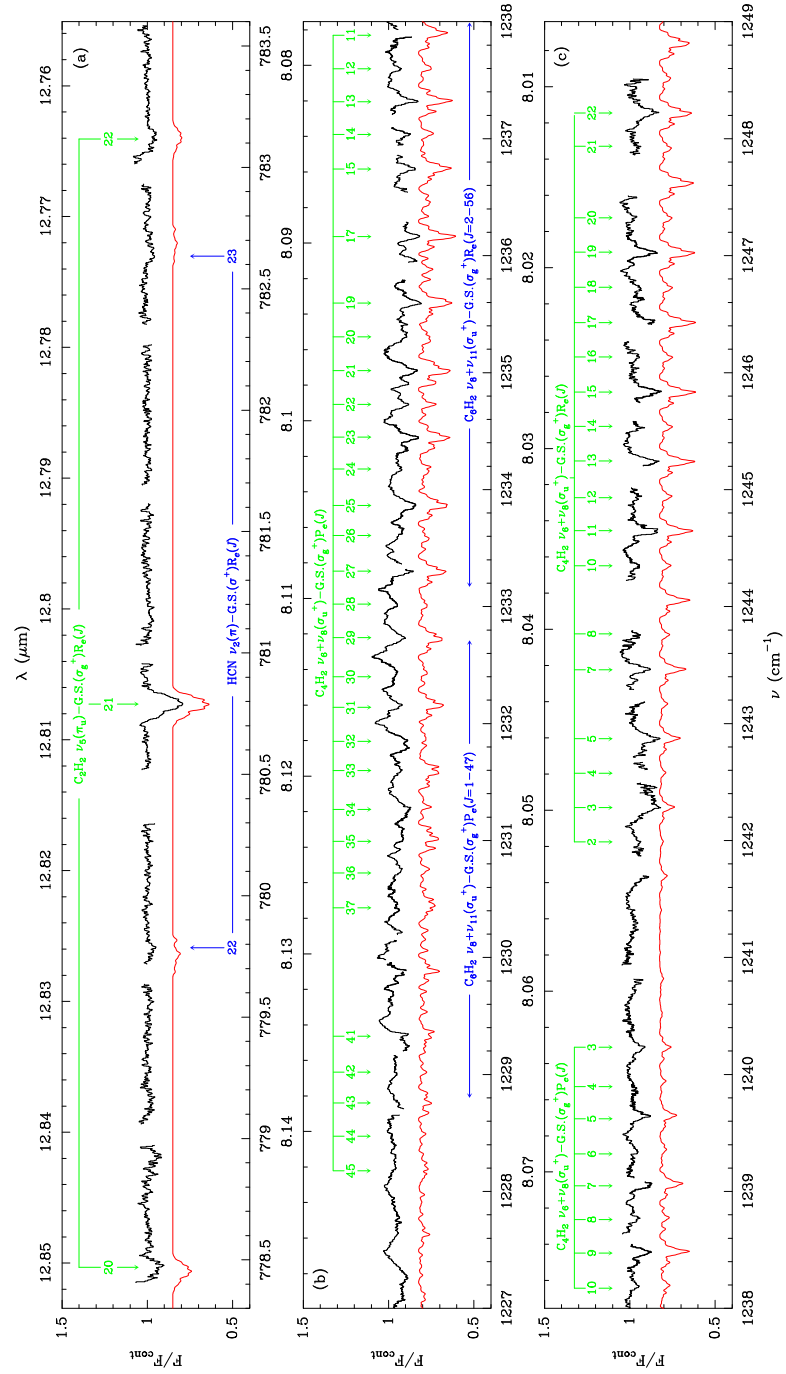


FIGURA 6.1.— Espectro de CRL618 observado y modelo entre 778.4 y 783.6 cm^{-1} y entre 1227 y 1249 cm^{-1} . En el rango $778.4 - 783.6 \text{ cm}^{-1}$ se pueden ver algunas líneas del C_2H_2 y del HCN mientras que en el rango $1227 - 1249 \text{ cm}^{-1}$ las líneas son de C_4H_2 y C_6H_2 . El rango $1227 - 1233 \text{ cm}^{-1}$ presenta una ondulación con una semilongitud de onda del mismo orden que las anchuras de las líneas observadas que introduce diferencias significativas entre el espectro observado y el calculado (ver texto para más detalles). Las líneas sintéticas ajustan razonablemente bien las líneas observadas.

Becklin-Neugebauer (BN)¹ como referencia para detectar los posibles efectos telúricos que sufrieran las observaciones de CRL618, ya que hasta el momento no se han observado líneas espectrales con el monocromador TEXES en este objeto en el rango espectral en consideración. La anchura de rendija del monocromador se fijó en $1''.4$ aproximadamente en todas las configuraciones, mientras que su longitud y su cobertura espectral sí variaron con la configuración. Cada 16 segundos se sacó a CRL618 fuera de la rendija para eliminar la emisión de fondo. Los datos fueron procesados utilizando el *software* de reducción de datos de TEXES (Lacy et al., 2002, ver Sección 4.1). Posteriormente, el espectro ha sido normalizado y hemos eliminado la línea de base utilizando polinomios de grado 4 como máximo. El intervalo de frecuencias $1205 - 1227 \text{ cm}^{-1}$ presenta una ondulación con una semilongitud de onda del mismo orden que las anchuras de las líneas observadas. Por lo tanto, no lo consideraremos en este trabajo.

El espectro tomado con TEXES/IRTF se ha completado con las observaciones del continuo entre 2.4 y $45 \mu\text{m}$ tomado con el satélite SWS/ISO el 27 de Marzo del 1998. En la Sección 6.2 discutiremos la validez de la hipótesis por la que consideramos compatibles estos datos con los de TEXES/IRTF.

Para estudiar los datos de los que disponemos ha sido necesario considerar en nuestros cálculos 42 estados vibracionales con 66 niveles rotacionales cada uno para el C_4H_2 , 163 estados vibracionales con 104 niveles rotacionales para el C_6H_2 , 347 estados vibracionales con 144 niveles rotacionales para el C_8H_2 , 4 estados vibracionales y 65 niveles rotacionales para el C_2H_2 y 3 estados vibracionales y 65 niveles rotacionales para el HCN (ver Sección 2.2). Todos los estados vibracionales utilizados tienen energías menores o iguales que los estados vibracionales superiores de las transiciones rovibracionales detectadas ($\lesssim 1200 \text{ cm}^{-1}$). La consideración de tantos estados vibracionales es necesaria por el método utilizado en el cálculo de las poblaciones. Los estados vibracionales de mayor energía pueden ser despreciados pues las temperaturas existentes en la CSE de CRL618 son $\lesssim 200 \text{ K}$.

6.2. Resultados y discusión

CRL618 no es una fuente esférica (ver Secciones 1.1.7 y 1.3), procediendo la principal asimetría de los chorros de gran velocidad. Tanto estos chorros como el toro contienen una cantidad significativa de polvo que puede ser considerada como formada por granos estáticos, incluso para las velocidades de expansión que se alcanzan en los chorros ($\simeq 200 \text{ km s}^{-1}$, Cernicharo et al., 1989). Las bandas que se encuentran en el continuo y que son producidas por el polvo son tan anchas que los desplazamientos Doppler son imperceptibles. Por lo tanto, esta componente de la CSE puede ser tratada como esféricamente simétrica en primera aproximación.

El primer paso para derivar cualquier tipo de información a partir del estudio de un espectro molecular es determinar las propiedades del campo radiativo que afecta a las moléculas, en este caso procedente del polvo y de la fuente central (Figura 6.2). Llama la atención la falta de la banda de SiC a $11.3 \mu\text{m}$ (Thronson, 1981). La inclusión en los cálculos del SiC de los granos que se encontrarían en los restos de la CSE-AGB produce la banda a $11.3 \mu\text{m}$ en absorción y una modificación fácilmente reconocible en el espectro sintético entre 6 y $12 \mu\text{m}$. No es posible encontrar dichas estructuras en los datos observacionales. Teniendo en cuenta que el SiC podría existir en los granos de polvo ya que CRL618 es un objeto rico en carbono, esta falta podría indicar que los granos están formados por núcleos de SiC rodeados por un manto ópticamente opaco de algún tipo de material carbonáceo. Nótese que la banda detectada en emisión a $28 \mu\text{m}$ en IRC+10216 (Cernicharo et al., 1999) aparece en CRL618 en absorción, lo que sugiere que está producida por granos de polvo fríos de la CSE-AGB.

¹El Objeto de Becklin-Neugebauer es una estrella joven rodeada por una nube opaca de gas y polvo en la Nebulosa de Orión Becklin & Neugebauer (1967).

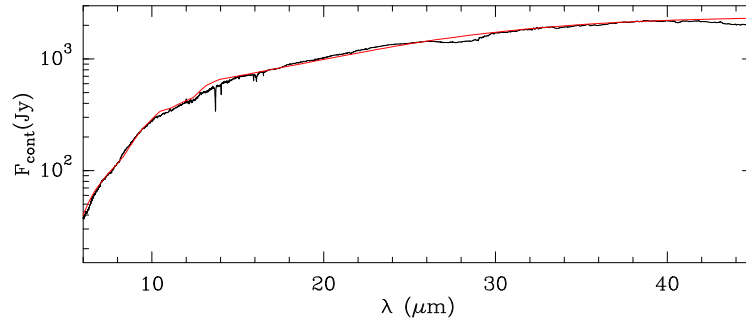


FIGURA 6.2.— Continuo de CRL618 (SWS/ISO) y ajuste entre 6 y 45 μm . Las observaciones no muestran la existencia de la banda del SiC a 11.3 μm aunque sí se observa aquella a 28 μm en absorción. Es posible obtener un ajuste de muy buena calidad considerando granos de polvo formados únicamente por carbono amorfo (ver texto para más detalles).

En consecuencia, sólo es necesario utilizar granos formados por carbono amorfo para ajustar con gran precisión el continuo entre 6 y 40 μm . Hemos tomado las propiedades ópticas del carbono amorfo, AC, de los datos de [Rouleau & Martin \(1991\)](#). Los parámetros obtenidos del ajuste se pueden encontrar en la Tabla 6.1. Para ajustar el continuo se requiere una fuente central con una temperatura de cuerpo negro de $\simeq 400$ K que representa la emisión de la región HII en el infrarrojo cercano-medio. El mejor ajuste considera una CSE que se extiende desde la región HII hasta una distancia de 600 R_{HII} , donde R_{HII} es el radio promedio de la región HII, estando dividida en 250 capas esféricas calculadas utilizando un paso logarítmico. El espectro sintético se desvía del observado a longitudes de onda mayores que 40 μm . El decrecimiento sufrido por los datos observacionales en esa región del espectro puede deberse a un efecto instrumental, ya que no se espera una variación tan importante.

Entre las observaciones tomadas con SWS/ISO y con TEXES/IRTF hay un intervalo de 4 años. Durante este tiempo la componente de polvo de la envoltura se ha debido separar de la estrella central un $\simeq 5 - 10\%$ reduciéndose las temperaturas del polvo del toro y de la región HII. Por lo tanto, son esperables variaciones $\lesssim 10\%$ en el nivel del continuo a 8 μm . Estas modificaciones se pueden englobar dentro del error considerado permitiendo el uso de las observaciones realizadas con SWS/ISO en el presente trabajo (ver Tabla 6.1).

Los espectros observados contienen las bandas fundamentales C_4H_2 $\nu_6 + \nu_8(\sigma_u^+)$ y C_6H_2 $\nu_8 + \nu_{11}(\sigma_u^+)$. Un estudio más profundo de las condiciones físicas de la envoltura interna necesitaría observaciones adicionales de otras bandas de estas especies. Las líneas de estas bandas no parecen tener componente en emisión y la relación señal-ruido es algo pequeña y enmascara las posibles irregularidades de los perfiles de línea generadas por movimientos de gases en la envoltura. Estas razones hacen difícil la obtención de una temperatura vibracional confiable por lo que supondremos que el gas está en ETL como una aproximación razonable a la situación real. De esta manera es posible estimar la abundancia de cada especie molecular utilizando las componentes en absorción de las líneas ([Fonfría et al., 2008](#)), además de otros parámetros geométricos (Figura 6.3).

Adelantándonos al proceso de ajuste, que veremos a continuación, es necesario comentar que la calidad del espectro en el rango $1227 - 1233 \text{ cm}^{-1}$ es peor que en el resto del espectro observado (ver Figura 6.1). Si bien esta degradación de la calidad no es observable a simple vista, está sugerida por la comparación entre los espectros experimental y sintético. Existen diferencias observables entre las profundidades de las líneas de ambos espectros. Además, parece existir una componente en emisión en las líneas del C_4H_2 $\nu_6 + \nu_8(\sigma_u^+)$ $P_e(29)$ y (31) no existente ni en el espectro sintético ni en el resto del observado. Tal vez fuera po-

TABLA 6.1.— Parámetros derivados

Parámetro	Unidades	Valor	Comentarios
D	pc	900	Asumido ^a
γ_d AGB		0.39	Asumido ^{b,c}
a	μm	0.1	Asumido
$\alpha(R_{\text{HII}})$	arcsec	0.135	Asumido ^d
v_{toro}	km s^{-1}	15	Asumido ^d
$N(\text{HCN})$	cm^{-2}	$(7.2^{+1.7}_{-1.5}) \times 10^{17}$	Derivado ⁶
$N(\text{C}_2\text{H}_2)$	cm^{-2}	$(5.0^{+1.2}_{-1.0}) \times 10^{17}$	Derivado ²
$N(\text{C}_4\text{H}_2)$	cm^{-2}	$(9.0^{+2.1}_{-1.6}) \times 10^{16}$	Derivado ⁴
$N(\text{C}_6\text{H}_2)$	cm^{-2}	$(4.0^{+0.8}_{-0.7}) \times 10^{16}$	Derivado ⁵
γ_d toro		$0.040^{+0.012}_{-0.013}$	Derivado ¹
T_{d1}	K	110^{+25}_{-18*}	Derivado ¹
T_{d2}	K	100 ± 5	Derivado ¹
R_{d2}	R_{HII}	$11.0^{+1.0}_{-0.6}$	Derivado ¹
v_{tur}	km s^{-1}	6.0 ± 0.9	Derivado ³
T_{HII}	K	405^{+55}_{-65}	Derivado ¹
$T_K(R_{\text{HII}})$	K	200^{+10}_{-7}	Derivado ²
$T_K(R_{d2})$	K	50^{+16}_{-11}	Derivado ²
$\tau_d(11 \mu\text{m})$		$1.50^{+0.30}_{-0.25}$	Derivado ¹
ξ		$1.2^{+0.7}_{-0.4}$	Derivado ¹

Estos parámetros han sido obtenidos tras ajustar el continuo y las líneas rovibracionales del HCN, C₂H₂, C₄H₂ y el C₆H₂. D es distancia a la estrella, γ_d toro y γ_d AGB son los exponentes de la ley de temperatura del polvo en el toro y en la CSE-AGB, T_{HII} es la temperatura de cuerpo negro de la región HII, $\tau_d(11 \mu\text{m})$ es la profundidad óptica del polvo, a es el radio de un grano de polvo genérico y $\alpha(R_{\text{HII}})$ es el radio angular de la región HII. El resto de los parámetros están relacionados únicamente con el toro: $N(X)$ representa una densidad de columna para la especie X , v_{toro} es la velocidad de expansión del gas, T_{d1} y T_{d2} son las temperaturas del polvo en las fronteras interna y externa, R_{d2} es el radio de la frontera externa, v_{tur} es la velocidad de turbulencia, T_K es la temperatura cinética del gas, y ξ es la razón entre la profundidad óptica del polvo de la CSE-AGB y la del toro. Hemos calculado los errores variando los parámetros relativos al (1) continuo, (2) C₂H₂ $\nu_5 R_e(21)$, (3) C₄H₂ $\nu_6 + \nu_8 R_e(7)$, (4) C₄H₂ $\nu_6 + \nu_8 R_e(22)$, (5) C₆H₂ $\nu_8 + \nu_{11} R_e(34)$, y (6) HCN $\nu_2 R_e(23)$. Estos errores representan los valores máximo y mínimo que puede adoptar cada parámetro sin desviarse más del 10 % de la profundidad de la componente en absorción en el caso de las líneas y del máximo de emisión en el caso del continuo. Hay ciertos parámetros señalados con el símbolo * que no llegan nunca a separarse el 10 % del mejor ajuste, por lo que hemos utilizado un 5 % en esos casos. (a) [Sánchez-Contreras et al. \(2004a\)](#), (b) [Fonfría et al. \(2008\)](#), (c) [Sopka et al. \(1985\)](#), (d) [Pardo et al. \(2004b\)](#).

sible la existencia de dicha componente en emisión en el resto de las líneas del espectro pero la razón señal-ruido hace imposible asegurarlo, lo que implica que de existir es débil. Por otro lado, si esa componente fuera real debido a algún proceso molecular selectivo (como un solapamiento intenso con otra línea molecular), también deberían estar afectadas las líneas de la banda R_e que involucraran alguno de los niveles participantes en las líneas $\nu_6 + \nu_8(\sigma_u^+)P_e(29)$ y (31). Desafortunadamente, el espectro del que disponemos no contiene las líneas de la banda R_e que deberían estar afectadas, por lo que no es posible corroborar o desmentir si estos solapamientos son o no reales. Examinando la transmitancia atmosférica se observa un patrón ondulatorio con una longitud de onda similar a las anchuras de las líneas en el rango mencionado que no aparece en el resto del espectro, donde hay variaciones en la transmitancia (a veces intensas) pero probablemente procedentes de transiciones

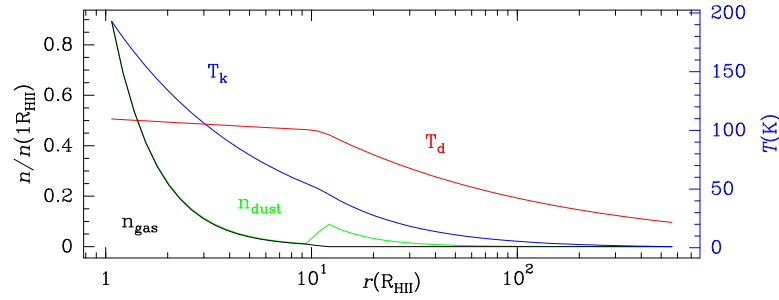
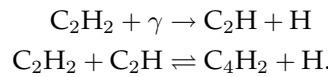


FIGURA 6.3.— Densidad del gas y del polvo normalizada a sus valores en la frontera interna del toro, y temperaturas cinéticas del gas y del polvo.

moleculares telúricas. Este hecho parece sugerir que esas diferencias entre los dos espectros tienen su origen en el procedimiento de observación, puesto que la transmitancia atmosférica no debe tener este tipo de comportamientos. Por lo tanto, las líneas pertenecientes al rango $1227 - 1233 \text{ cm}^{-1}$ no son adecuadas para la derivación de valores representativos de la geometría y los procesos moleculares que se dan en CRL618. No obstante, la gran cantidad de líneas encontradas en el resto del espectro hacen que la pérdida de ese rango no influya en la calidad de los resultados de este trabajo.

La forma más eficiente de que se produzca C_4H_2 y C_6H_2 es a partir del C_2H_2 mediante las siguientes reacciones (Cernicharo et al., 2001b; Cernicharo, 2004a):



Es por ello que no esperamos encontrar C_4H_2 y C_6H_2 en los lóbulos aunque sí en la frontera interna del toro, cerca de la PDR, donde la abundancia de C_2H_2 es grande y hay suficiente radiación UV procedente de la estrella central como para disociar el C_2H_2 y generar C_2H . Sin embargo, la contribución del gas de las regiones de los lóbulos más próximas a la región HII es muy pequeña en comparación con la del resto de la envoltura a causa del pequeño ángulo sólido subtendido. La estabilidad molecular del C_2H_2 y del HCN sugiere su posible presencia incluso en los chorros de materia, aunque no esperamos que su temperatura de excitación sea muy grande comparada con la del resto de la envoltura interna, lo que implica una emisión pequeña por parte del C_2H_2 y del HCN. Por lo tanto, no esperamos que la supresión de estos en el modelo produzca modificaciones significativas en los resultados.

En la primera aproximación al ajuste de las líneas de la banda del C_4H_2 hemos utilizado la rama R, ya que las de la rama P están afectadas por las líneas del C_6H_2 . En los perfiles de las líneas de la rama R del C_4H_2 es posible observar una estructura compleja que aparece claramente al representar todas las líneas juntas (ver los cuadros a y b de la Figura 6.4). Esta estructura está compuesta por una componente en absorción principal (\mathcal{R}_1), correspondiente a las líneas de la rama R del C_4H_2 , y una serie de absorciones secundarias a diferentes velocidades relativas con respecto a \mathcal{R}_1 (\mathcal{R}_5 , \mathcal{R}_4 , \mathcal{R}_3 , \mathcal{R}_2 , \mathcal{B}_1 , \mathcal{B}_2 y \mathcal{B}_3). Las componentes \mathcal{R}_2 y \mathcal{B}_1 se observan como dos incrementos en la absorción de la componente \mathcal{R}_1 , a su derecha e izquierda, con respecto al perfil de línea esperado que generaría una distribución gaseosa simétrica y expandiéndose con un campo de velocidades constante o uniformemente acelerado. Estos incrementos en la absorción podrían proceder de variaciones en la profundidad óptica de ciertas regiones del toro. Sin embargo, las componentes \mathcal{R}_5 , \mathcal{R}_4 , \mathcal{B}_2 y \mathcal{B}_3 tienen velocidades relativas mayores (en módulo) que la velocidad de expansión del toro de CRL618 ($v_{\mathcal{R}_5} \simeq 35 \text{ km s}^{-1}$, $v_{\mathcal{R}_4} \simeq 28.5 \text{ km s}^{-1}$, $v_{\mathcal{B}_2} \simeq -7.5$ y $v_{\mathcal{B}_3} \simeq -15 \text{ km s}^{-1}$; Pardo et al. 2004b proponen $v_{\text{exp}} \simeq 12 - 18 \text{ km s}^{-1}$ y $v_{\text{microturbulencia}} \simeq 3.5 \text{ km s}^{-1}$ a partir de observaciones en radiofrecuencias), lo que implica que no pueden ser generadas por él.

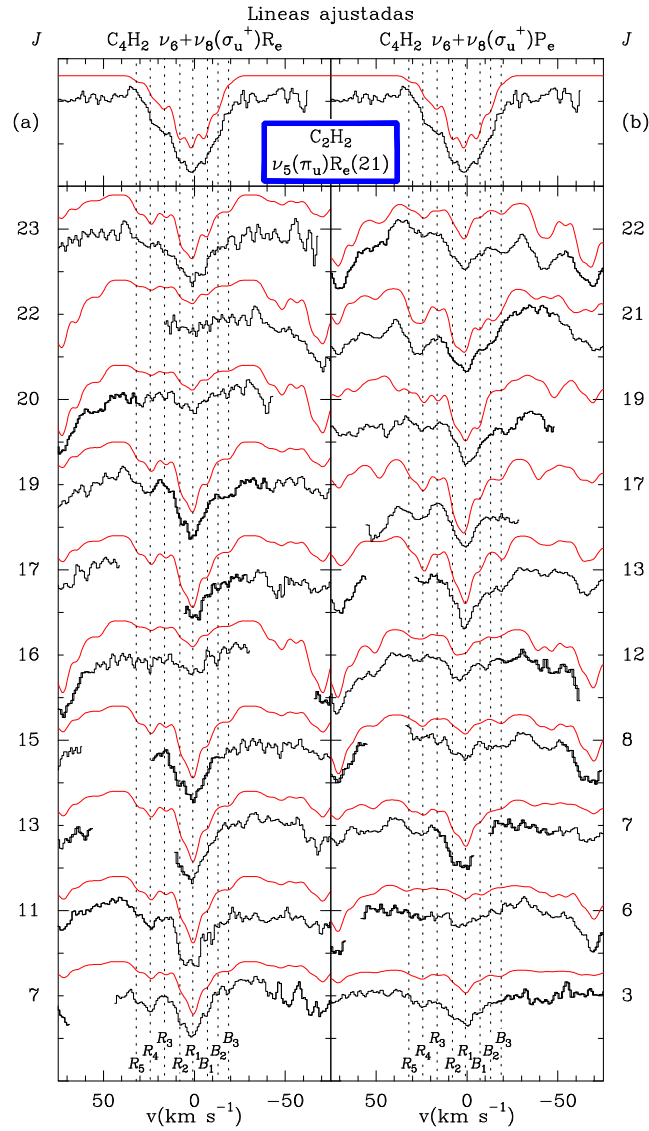


FIGURA 6.4.— Selección de líneas observadas de las ramas $\nu_6 + \nu_8(\sigma_u^+)\text{Re}$ y Pe del C_4H_2 y sus respectivos perfiles sintéticos. Hay 6 contribuciones significativas en los perfiles de todas las líneas (R_5 , R_4 , R_3 , R_2 , R_1 , B_1 , B_2 y B_3). Todas estas líneas de la rama $\nu_6 + \nu_8(\sigma_u^+)\text{Pe}$ del C_4H_2 están solapadas con las de la rama $\nu_8 + \nu_{11}(\sigma_u^+)\text{Re}$ del C_6H_2 . Se ha incluido en ambos cuadros (a y b) la línea de C_2H_2 $\nu_5(\pi_u)\text{Re}(21)$ para comparar los perfiles de línea.

Por otro lado, estas absorciones secundarias tampoco pueden estar formadas por las bandas calientes $\nu_6 + \nu_8 + x - x$, donde $x = \nu_9$, ν_7 y otros estados vibracionales con energías mayores. Las frecuencias de esas transiciones rovibracionales son muy cercanas a las de la banda $\nu_6 + \nu_8$ (las diferencias en frecuencias son $< 1 \text{ cm}^{-1}$ en módulo, [McNaughton & Bruget, 1992](#)) pero la temperatura vibracional es demasiado pequeña como para generar dichas componentes, siendo necesarias temperaturas de excitación $\sim 1000 \text{ K}$ o un aumento de la abundancia de C_4H_2 en dos órdenes de magnitud. Incluso en el caso de que la estructura vibracional estuviera fuera de ETL, el valor de la temperatura vibracional requerido sería demasiado elevado. Además, como se puede ver en la Figura 6.4, la línea de C_2H_2

también presenta dichas absorciones con las mismas velocidades relativas con respecto a la componente principal. En este caso la asociación de las líneas de las bandas calientes $\nu_5 + x - x$ (siendo $x = \nu_4, \nu_5, \nu_4 + \nu_5, \nu_2, \dots$) del C_2H_2 con esas absorciones es imposible puesto que las primeras tienen frecuencias bastante distintas a las de las líneas de la banda fundamental ν_5 (ver Capítulo 4 y, por ejemplo, Jacquemart et al., 2001). Para el C_6H_2 la contribución esperada de las bandas calientes está por debajo del nivel del ruido de las observaciones por lo que los perfiles de línea están dominados por las transiciones de la banda fundamental $\nu_8 + \nu_{11}$.

Estos razonamientos refuerzan el hecho de que estas absorciones están formadas en regiones que no forman parte del toro según lo estamos considerando en este trabajo. Podemos sugerir dos escenarios distintos para explicarlas:

- hay varias capas o casquetes de materia contrayéndose y expandiéndose más rápido que el toro. Podría ser posible encontrar capas discretas de materia eyectada por la estrella central esféricamente y de forma discontinua a velocidades grandes.
- Las absorciones observadas están formadas por condensaciones o nódulos de gas moviéndose a diferentes velocidades en algún lugar cerca de la región HII, lo cual es compatible con la visión de Beckwith et al. (1978) y Burton & Geballe (1986).

Podemos pensar en una capa moviéndose más rápida o lentamente que el toro en la frontera interna pero no más allá de la frontera externa. La primera razón es que parece ser necesaria la presencia de radiación UV para la formación del C_4H_2 y del C_6H_2 , y no es posible encontrarla más allá del toro (en la CSE-AGB) porque ésta es ópticamente muy opaca a esas longitudes de onda por la presencia del polvo circunestelar (Bujarrabal et al., 1988). Podría ser posible encontrar C_4H_2 y C_6H_2 en la zona externa de la CSE-AGB donde la radiación UV Galáctica tal vez pudiera desencadenar las reacciones de formación de C_4H_2 y C_6H_2 . Sin embargo, es muy probable que su abundancia fuera bastante pequeña debido a que estas regiones son poco densas (Cernicharo, 2004a). La segunda razón es que si hubiera una capa acelerada por el gas del toro en la zona de interacción entre éste y la CSE-AGB con una cierta abundancia de C_4H_2 y C_6H_2 , esta capa debería tener una velocidad de expansión necesariamente menor o igual que la del toro como consecuencia de su interacción con el gas de la CSE-AGB, por lo que sólo podría producir modificaciones en torno a la componente \mathcal{R}_1 con velocidades relativas menores que v_{exp} . Esto podría explicar la presencia de las absorciones \mathcal{R}_2 y \mathcal{B}_1 pero no la de, por ejemplo, \mathcal{R}_5 y \mathcal{B}_3 . Sin embargo, sí sería posible encontrar capas discretas en la zona externa de la región HII suponiendo que la estrella central eyectara materia a grandes velocidades. La frontera interna del toro podría interactuar con esas capas reflejando parte de ellas de nuevo hacia la estrella central por la mayor densidad gaseosa del toro.

La segunda propuesta que explica las observaciones parece ser la más compatible con trabajos anteriores (Beckwith et al., 1978; Burton & Geballe, 1986), por lo que haremos los cálculos según esta visión de la región interna de CRL618. No obstante, ambas posibilidades generarían observaciones similares (ver Sección 3.3.14), por lo que la discusión siguiente es aplicable a las dos.

La emisión de la región HII es al menos 5 órdenes de magnitud mayor que aquella procedente de cualquier región con un parámetro de impacto, b , mayor que R_{HII} . Por lo tanto, un nódulo con $b > R_{\text{HII}}$ no es capaz de modificar el espectro significativamente y crear las absorciones observadas. Pero una condensación con $b < R_{\text{HII}}$ sí puede producir ese efecto². Hay muchas incertidumbres relativas a ellas por lo que tratar de obtener valores precisos para los parámetros físicos no es posible con los datos (y los conocimientos de CRL618) disponibles. Aún así, podemos estimar la columna de densidad y la velocidad

²No olvidemos que lo que entendemos por *condensación* es una región con dimensiones mucho menores que la longitud característica de la envoltura. En este caso, tomar condensaciones con dimensiones menores (o incluso del mismo orden) que el radio de la región HII, R_{HII} , sería una elección razonable.

de microturbulencia del C_4H_2 para cada condensación. Para ello utilizamos el hecho de que cada nódulo se puede representar aproximadamente para un telescopio de un único disco como un anillo equivalente (ver Sección 3.3.14 y Apéndice A.10). Los resultados de los ajustes sugieren que todos los anillos equivalentes cumplen que $N(C_4H_2) \simeq 2 - 7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ y $v_{\text{microturbulencia}} \simeq 6 \text{ km s}^{-1}$, siendo el valor de la densidad de columna un límite inferior. Utilizando la Ec. 3.60 podríamos estimar la densidad de columna de una forma más precisa si conociéramos las dimensiones del nódulo, lo cual es imposible actualmente. El límite inferior a la densidad de columna de estos nódulos para el C_2H_2 es del mismo orden o menor que la del C_4H_2 , es decir, $N(C_2H_2) \simeq 5 - 50 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. A pesar de que estas densidades de columna de las condensaciones puedan parecer muy grandes, no olvidemos que en la zona interna del toro, y suponiendo una ley de densidad proporcional a r^{-2} , el 50 % de la densidad de columna está en una capa de $1 R_{\text{HII}}$ pegada a la región HII. Suponiendo una densidad de columna esperada de $\sim 10^{17} \text{ cm}^{-2}$, la densidad de columna en el primer radio estelar sería $\sim 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, valor acorde con la densidad de columna de los anillos equivalentes a los nódulos. Adoptando la vía de formación del C_4H_2 y el C_6H_2 por la que surgen de la disociación del C_2H_2 por la acción de la radiación UV, la abundancia de C_2H_2 debería decrecer para adoptar los valores calculados al tiempo que crecen las de C_4H_2 y C_6H_2 . Es decir, este mecanismo es compatible con las densidades de columna calculadas para los nódulos.

Estos resultados también se refieren al supuesto caso de las capas (o casquetes) eyectadas por la estrella por similitud con los nódulos en cuanto a los efectos que producen en la radiación emitida por la zona interna de CRL618 (ver Sección 3.3.14). Si bien estas capas podrían tener una componente en emisión a velocidades distintas que la de absorción y producida principalmente por las partes de esas capas con $b > R_{\text{HII}}$, esa contribución sería muy pequeña y no observable en nuestro espectro.

A la vista de lo anterior, la gran anchura de la línea $\nu_5(\pi_u)R_e(21)$ del C_2H_2 no parece proceder de la absorción radiativa por parte de las moléculas en los chorros sino de la absorción de los nódulos o capas que hemos supuesto. La temperatura del gas de la envoltura y su densidad son demasiado pequeñas como para generar modificaciones significativas en el rango de frecuencias observado. En consecuencia, la contribución de los chorros de materia a gran velocidad en nuestro espectro es despreciable.

Todos los ajustes relacionados con las líneas moleculares han sido realizados dividiendo la CSE en 50 capas mediante el uso de un paso logarítmico y utilizando también un radio externo de $600 R_{\text{HII}}$. Los ajustes de las líneas del C_2H_2 , C_4H_2 y C_6H_2 sugieren una relación orto-para de 3:1 para esas especies. La información geométrica y los parámetros físicos del toro derivados de los ajustes de las líneas se muestran en la Tabla 6.1. Los ajustes de las líneas del C_4H_2 y del C_6H_2 son buenos si consideramos una abundancia nula fuera del toro para estas especies. Las densidades de columna obtenidas para el C_4H_2 y el C_6H_2 son $\simeq 9.0 \times 10^{16}$ y $\simeq 4.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, respectivamente, siendo muy similares a los valores $N(C_4H_2) \simeq 1.2 \times 10^{17}$ y $N(C_6H_2) \simeq 6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ propuestos por [Cernicharo et al. \(2001a\)](#). Por otro lado, las densidades de columna para el C_2H_2 y el HCN son $\simeq 5.0 \times 10^{17}$ y $\simeq 7.2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ en toda la envoltura. Es posible estimar la densidad de columna de estas especies en el toro adoptando abundancias para estas especies $\simeq 8 \times 10^{-5}$ y $\simeq 2 \times 10^{-5}$ en la CSE-AGB (como en la envoltura externa de IRC+10216; [Fonfría et al., 2008](#)), dando lugar a $\simeq 1.6 \times 10^{17}$ y $\simeq 5.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$. El valor de C_2H_2 obtenido para toda la envoltura es compatible con $N(C_2H_2) \simeq 2 \times 10^{17}$ propuesto por [Cernicharo et al. \(2001a\)](#), mientras que el que dan para el HCN ($\simeq 1.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$) es 4 – 5 veces menor que el derivado de nuestros ajustes. Este desacuerdo probablemente proceda de la pequeña resolución espectral de las observaciones de ISO, de la gran opacidad de las líneas de HCN y de la gran anchura del haz de SWS/ISO en comparación con el de TEXES/IRTF que promedia toda la envoltura. En estas condiciones los valores obtenidos de los ajustes de los datos de ISO son poco precisos.

No ha sido posible encontrar ningún signo inconfundible de la presencia del C_8H_2 . Sus

líneas están demasiado juntas para poder ser resueltas con los instrumentos utilizados por lo que la banda $\nu_{10} + \nu_{14}$ (supuestamente en el rango observado) debería aparecer como una variación en la línea de base esperada con la forma de la envolvente de la banda. Aunque la relación señal-ruido debería permitir observar esta envolvente, en la práctica es extremadamente difícil a causa de la gran densidad de líneas que contiene el espectro. Además, la línea de base puede estar afectada por efectos telúricos e instrumentales no controlables que produzcan oscilaciones y variaciones similares a la envolvente buscada. En consecuencia, no nos es posible asegurar que la banda de C_8H_2 sea observable en nuestro espectro. Podemos dar un límite superior a su densidad de columna modelando la banda completa de tal modo que la diferencia entre el valor máximo de la emisión (normalizada) y el valor mínimo fuera igual a $1/3$ de la misma diferencia para las líneas de C_4H_2 que son las que dominan el espectro, habiendo impuesto la condición sobre el C_8H_2 de que sólo exista en el toro. El resultado es $N(C_8H_2) \lesssim 5 - 10 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. Esta densidad de columna es muy parecida a la de C_6H_2 por lo que no sería extraño que su valor real fuera $2 - 3$ veces menor que el límite obtenido. Los anteriores resultados apoyan el modelo de química propuesto por Cernicharo (2004a) por el que la abundancia de los poliínos, $C_{2n}H_2$, disminuye con n aunque es necesaria una mejor determinación de la densidad de columna del C_8H_2 para restringir todavía más los procesos químicos que se desarrollan en el toro.

6.3. Conclusiones

Las observaciones infrarrojas nos proporcionan un excelente útil de trabajo para el estudio del gas templado/caliente que rodea a la región HII de las PPNe. Los espectros tomados con el monocromador TEXES en torno a los $8 \mu\text{m}$ nos han permitido estudiar en detalle las bandas $\nu_6 + \nu_8$ y $\nu_8 + \nu_{11}$ del C_4H_2 y del C_6H_2 , respectivamente. Como consecuencia de dicho estudio, hemos obtenido una cantidad apreciable de información que resumimos a continuación:

1. El modelado de las líneas de ambas bandas ha sido posible considerando que la zona interna de la envoltura circunestelar tiene simetría esférica y los chorros de materia eyectada a gran velocidad no influyen en la emisión estudiada.
2. Las densidades de columna obtenidas para el C_4H_2 y el C_6H_2 , limitando su presencia al toro, son $\simeq 9.0 \times 10^{16}$ y $\simeq 4.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. Estos valores son compatibles con los propuestos anteriormente por Cernicharo et al. (2001a). Las densidades de columna del C_2H_2 y del HCN son $\simeq 5.0 \times 10^{17}$ y $\simeq 7.2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$, tomando valores en el toro $\simeq 1.6 \times 10^{17}$ y $\simeq 5.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$. Los resultados son también compatibles con los propuestos anteriormente por estos autores, aunque se observan discrepancias en los datos del HCN posiblemente relacionadas con la incapacidad de ISO de proporcionar perfiles de línea precisos con los que obtener densidades de columna no afectadas por la gran opacidad de esta especie. Además, el haz de SWS/ISO es significativamente mayor que el de TEXES/IRTF estando los datos de ISO promediados en toda la envoltura. Los valores para las densidades de columna apoyan el modelo de química para la generación de los poliínos propuesto por Cernicharo (2004a).
3. El límite superior a la densidad de columna del C_8H_2 es $\sim 5 - 10 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$.
4. La línea $\nu_5 (\pi_u)R_e(21)$ del C_2H_2 y las de la rama R del C_4H_2 presentan pequeñas absorciones en torno al mínimo de emisión. En el resto de las líneas no se observan debido al ruido y a solapamientos con otras líneas. Se puede explicar su presencia:
 - mediante la inclusión en la envoltura de nódulos o condensaciones de gas en la zona externa de la región HII que se mueven en todas direcciones y a diferentes velocidades o

- mediante capas o casquetes eyectados por la estrella central a grandes velocidades hacia el toro, siendo reflejados por éste durante su interacción con el gas denso que lo forma.

Estos objetos (capas eyectadas o nódulos) tienen densidades de columna para el C_4H_2 y el $C_2H_2 \gtrsim 2 - 8 \times 10^{16}$ y $\gtrsim 5 - 50 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, respectivamente, suponiendo que su temperatura es similar a la del gas de la frontera interior del toro.

De nuevo las observaciones infrarrojas son muy útiles para estudiar las regiones más internas de los objetos post-AGB. Sería posible obtener una gran cantidad de información a través del estudio de otros espectros a otras longitudes de onda distintas en el infrarrojo, ya sea cercano, medio o lejano. Futuros trabajos que incluyan varias bandas fundamentales, bandas calientes y sobretonos serán capaces de completar los resultados que hemos obtenido dando información acerca de si las especies moleculares están o no en ETL, tanto vibracional como rotacionalmente, y utilizar estos resultados para restringir las condiciones físicas existentes en el toro y el campo de radiación generado en la región HII. Nuevas observaciones son necesarias para verificar o desmentir la existencia de los nódulos o capas eyectadas en la región HII que nos ha sido necesario incluir.

Al igual que en el trabajo sobre IRC+10216 en el infrarrojo medio (ver Capítulo 4), la utilización del monocromador TEXES (en telescopios como IRTF o Gemini), el satélite Herschel y el futuro interferómetro ALMA se erigen como las piedras angulares para la investigación de los entornos templados y calientes de las regiones HII de las PPNe. El estudio en mayor profundidad de dichos objetos nos podría dar información sobre los mecanismos de eyección de materia por parte de la estrella central en un periodo de la evolución estelar tan complejo como es el fin de la fase AGB y el comienzo de la fase PN.

Capítulo 7

Discusión global y perspectivas

A lo largo de estos tres últimos Capítulos, hemos presentado los trabajos realizados relativos al estudio espectroscópico de las regiones más internas de las envolturas circunestelares de la estrella AGB IRC+10216 y de la PPN CRL618. En este Capítulo trataremos de dar una visión global de los resultados obtenidos para acabar con un análisis de las perspectivas de futuro.

En esta Tesis, IRC+10216 ha sido estudiada utilizando observaciones en el infrarrojo medio ($\simeq 720 - 864 \text{ cm}^{-1}$; ver Capítulo 4) y en radiofrecuencias (en las bandas existentes entre 1 y 3 mm; ver Capítulo 5), mientras que CRL618 se ha observado únicamente en el infrarrojo medio ($\simeq 780 \text{ cm}^{-1}$ y $\simeq 1200 - 1250 \text{ cm}^{-1}$; ver Capítulo 6). Gracias a estas observaciones ha sido posible estudiar C_2H_2 , HCN y algunos de sus isotopómeros (IRC+10216 y CRL618, infrarrojo), SiS (IRC+10216, radio), C_4H_2 , C_6H_2 y C_8H_2 (CRL618, infrarrojo).

La reducción de los datos observacionales ha permitido obtener conclusiones sobre el comportamiento de las poblaciones tanto rotacionales como vibracionales de estas especies moleculares. Al mismo tiempo, se ha derivado una cantidad importante de información sobre la geometría de las fuentes y los procesos físicos existentes en las regiones más internas de las envolturas de ambos objetos. Parte de esta información es compatible con resultados de trabajos anteriores, avalando la consistencia del método de estudio y el modelo desarrollado. La otra parte supone una contribución a la teoría evolutiva de las estrellas evolucionadas con masas similares a la solar.

7.1. Nuevos datos sobre evolución estelar

Desde la década de los años 80 se sabe que existe C_2H_2 y HCN a lo largo de toda la CSE de IRC+10216. No obstante, si bien ha sido posible determinar con cierta fiabilidad los parámetros relativos a estas especies en las regiones más externas de la CSE, no ha ocurrido así con las más internas debido a la dificultad que ha supuesto hasta hace poco tiempo la realización de observaciones infrarrojas y la falta de observaciones en radiofrecuencias de gran resolución angular.

A partir de los trabajos realizados sobre IRC+10216 en esta Tesis (utilizando los espectros infrarrojos registrados con el monocromador TEXES), hemos podido verificar la existencia de un crecimiento sustancial de las abundancias del C_2H_2 y el HCN a distancias menores a $4 - 5 R_*$, como los modelos químicos sugieren. Para ello, ha sido necesario considerar velocidades de microturbulencia muy grandes en estas zonas que explicaran parte de la región de emisión de las líneas rovibracionales asociadas a estados vibracionales de pequeña energía. Estas velocidades de microturbulencia se pueden tomar como el modelo de un grupo de inhomogeneidades en el gas calientes y ricas en C_2H_2 y HCN que se mueven a velocidades grandes y prácticamente aleatorias cerca de la fotosfera estelar, acercándose y alejándose de ésta. Este aumento de la abundancia con respecto al resto del gas cerca de la estrella podría deberse o bien a una modificación de la química en estas

inhomogeneidades con respecto a la del resto del gas o bien simplemente a un aumento en la densidad del gas. El anterior escenario también explica la existencia de irregularidades observadas en los perfiles de las líneas rovibracionales asociadas a estados vibracionales de gran energía, es decir, generadas únicamente por el gas más cercano a la estrella.

Por otro lado, estas inhomogeneidades podrían estar íntimamente relacionadas con las estructuras existentes antes de la zona de formación de polvo y que dan lugar a los máseres de SiS dependientes del tiempo, observados en esta Tesis por vez primera en una envoltura circunestelar (a partir de las observaciones en radio en el telescopio de 30 m de IRAM). Tanto la existencia de estos máseres como su dependencia temporal pueden ser explicadas mediante el solapamiento entre ciertas líneas rovibracionales de C_2H_2 y HCN con algunas de SiS generadas en pequeñas regiones de la envoltura más interna y que en ciertos momentos presentan relaciones de velocidad específicas. Por lo tanto, la existencia de este fenómeno reside en gran parte en el comportamiento dinámico de parcelas de gas individuales cercanas a la fotosfera estelar. El posible solapamiento de líneas de C_2H_2 y HCN consigo mismas o con otras especies podría causar también perturbaciones en la temperatura rotacional de niveles rovibracionales (en diferentes estados vibracionales) asociados a ciertas líneas, presentando intensidades significativamente distintas a las esperadas. Este efecto también ha sido observado en los espectros infrarrojos en varias ocasiones, habiendo sido imposible el encontrar una explicación instrumental o relacionada con una posible contaminación atmosférica a este tipo de perturbaciones.

Las inhomogeneidades mencionadas parecen ir suavizándose o perdiendo importancia conforme el gas avanza hacia el exterior de la envoltura, ya que deja de observarse su influencia en la emisión generada por las regiones de la envoltura alejadas de la estrella.

Ciertos materiales refractarios que son generados en las regiones mencionadas anteriormente o incluso en la propia fotosfera estelar, condensan en forma de granos de polvo a $\simeq 5 R_*$ y $\simeq 20 R_*$. Estos granos, además de acelerar el gas debido a su interacción con la radiación UV estelar y al acoplamiento dinámico con éste, absorbe radiación UV estelar reemitiéndola a frecuencias menores. Dicho proceso da lugar a un intenso campo de radiación infrarroja que afecta de forma muy importante a las poblaciones de los estados vibracionales de C_2H_2 y HCN. La intensidad del campo de radiación en las regiones de la CSE en las que se forma el polvo es tal que una cantidad apreciable de moléculas son excitadas hasta estados vibracionales con energías tan grandes como $\simeq 4000 \text{ cm}^{-1}$. El efecto de cascada radiativa posterior puebla significativamente los estados vibracionales con energías menores situando a las especies estudiadas lejos del equilibrio termodinámico. Este gran incremento en la intensidad de radiación en la que el gas está inmerso debería afectar igualmente al resto de las especies moleculares existentes en la envoltura, incluso en las regiones más externas aunque de forma menos intensa.

El caso de CRL618 ilustra el siguiente paso en la evolución de las estrellas AGB ricas en carbono. Las regiones externas de la CSE se mantienen con condiciones (tanto físicas como químicas) similares a las encontradas en la envoltura externa de IRC+10216. No obstante, las regiones internas de CRL618 sí sufren modificaciones importantes con respecto a las de IRC+10216 aunque hay ciertas características que ambas envolturas parecen poseer. Del estudio del espectro infrarrojo observado con TEXES se deduce la existencia de inhomogeneidades en las regiones de la CSE formadas por gas molecular más próximas a la región HII. Estas inhomogeneidades presentan velocidades aleatorias lo que implica que, como en el caso de las sugeridas para IRC+10216, sus movimientos poseen componentes radiales de expansión y colapso. Sin embargo, el hecho de que las inhomogeneidades en CRL618 den lugar a absorciones resueltas en nuestras observaciones añade una diferencia importante con respecto al caso de IRC+10216, donde no ocurre así. Este hecho sugiere diferencias sustanciales en el tamaño, en la geometría, la temperatura cinética y la velocidad de microturbulencia del gas en las inhomogeneidades de una y otra fuente. Posiblemente la explicación más verosímil tenga que ver con la distinta naturaleza de los fenómenos que podrían dar lugar a las inhomogeneidades. Por un lado, las sugeridas en IRC+10216 de-

berían proceder del propio fenómeno de eyección de materia estelar, probablemente muy caótico e irregular. Por el otro lado, es probable que las consideradas en CRL618 estén compuestas por gas molecular aislado en las regiones más externas de la región HII y, por lo tanto, separadas por regiones amplias formadas por el gas atómico e ionizado característico de este tipo de entornos.

Las abundancias encontradas de C_2H_2 , C_4H_2 y C_6H_2 junto con la estimada de C_8H_2 son consistentes con modelos de química propuestos en la literatura para regiones sometidas a la acción de campos UV intensos. Los resultados de la reducción de los datos observacionales parecen indicar que dicho campo UV rodean las inhomogeneidades modificando la química principalmente en sus superficies y, en menor medida, en sus interiores.

7.2. Perspectivas y futuros estudios

Los trabajos desarrollados se han centrado fundamentalmente en la utilización de observaciones en el infrarrojo medio para estudiar con la mayor profundidad posible las regiones más internas (y en este caso, también más calientes) de las envolturas de estrellas evolucionadas. Los resultados han demostrado claramente que este tipo de observaciones son muy útiles, siendo una vía de estudio muy prometedora de entornos gaseosos que hasta el momento no ha sido posible conocer. La obtención de más información experimental sería de gran utilidad para establecer los mecanismos físicos que generan fenómenos tan importantes como los estudiados en esta Tesis, permitiendo avances significativos en las teorías evolutivas de las atmósferas estelares e, incluso, de los interiores de estrellas de tipo solar. Es por ello conveniente utilizar en la medida de lo posible este potencial observando otros objetos o tratando de obtener más información de IRC+10216 y CRL618.

Por el momento, parte de los resultados más significativos están relacionados con inhomogeneidades en el gas eyectado, el cual a su vez está directamente relacionado con la evolución violenta de el gas de la fotosfera estelar y la transferencia energética en esta, ya sea radiativa o térmicamente. En consecuencia, es importante aprender más acerca de las inhomogeneidades existentes en esta zona, ya sea mediante observaciones infrarrojas o utilizando técnicas interferométricas. Actualmente estamos planeando un estudio interferométrico del SiS en IRC+10216 con resoluciones espaciales de decenas de mas para intentar determinar la distribución de esta especie cerca de la fotosfera estelar. Esta distribución podría estar íntimamente relacionada con la formación del polvo circunestelar y, por lo tanto, con la aceleración de gas de la envoltura. Por otro lado, y debido a que este efecto aumenta la probabilidad de escape de la radiación generada en las regiones más internas, obtendríamos información que permitiría una mayor comprensión de la termodinámica en la región interna y que, a la postre, influye intensamente en la evolución dinámica del gas eyectado.

La verificación de la evolución química de los políinos sometidos a campos de radiación UV intensos en CRL618 también marca otro camino interesante de investigación en IRC+10216 además de otras estrellas AGB. Es bien sabido que IRC+10216 está en un periodo de su evolución tardía muy cercano al estadio PPN. De hecho, podría darse el caso de que ya se hubiera producido la transición entre estrella AGB y PPN y en estos momentos se estuviera generando la región HII característica de todas las PNe. Una manera de averiguar si este fenómeno está o no ocurriendo es la detección de C_4H_2 y C_6H_2 en las regiones internas de la CSE que no deberían aparecer en estas regiones (con la suficiente abundancia) si no existiera un campo radiativo UV lo suficientemente intenso.

Por otro lado, y centrándonos en la variedad de especies moleculares de IRC+10216, las observaciones en el infrarrojo nos pueden permitir encontrar especies moleculares aún desconocidas en estos objetos evolucionados y no observables en radiofrecuencias debido a sus simetrías. Este tipo de estudios, unidos a modelados de la química esperada, podría proporcionar información acerca de reacciones químicas existentes en estas regiones internas y calientes, en especial acerca de reacciones que se produzcan en las superficies de los granos de polvo y que podrían crear moléculas complejas imposibles de formarse en estado

gaseoso.

En este punto, dos instrumentos a utilizar muy importantes para el avance de la investigación de las regiones internas de este tipo de objetos serán en un futuro próximo el satélite Herschel y el interferómetro ALMA. Si bien ambos instrumentos no estudian el rango del infrarrojo medio, si pueden detectar emisión en parte del infrarrojo lejano y en microondas. Estas características, unidas a la ausencia de atmósfera en el caso de Herschel y a la reducción drástica de ésta junto con la gran resolución angular de ALMA, prometen proveernos de datos de gran calidad de los que obtener una información muy rica acerca de los sucesos presentes en las regiones internas de las estrellas evolucionadas.

Parte II

Determinación experimental de tasas de transferencia colisional moleculares a temperaturas pequeñas: colisiones $\text{N}_2:\text{N}_2$ como sistema de referencia

Capítulo 8

Las tasas de transferencia colisional

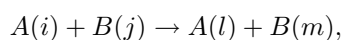
Desde la formulación de la Termodinámica, ha sido posible comprender los sólidos y los fluidos en *equilibrio termodinámico*. Este estado se puede concebir desde el punto de vista de la Física Estadística como el conjunto de configuraciones privilegiadas donde el sistema se comporta de forma prácticamente estacionaria. En realidad existe una probabilidad significativa de que cualquier sistema formado por una colectividad de objetos individuales sufra fluctuaciones que le aparten del conjunto de configuraciones que hemos llamado *equilibrio*, aunque estas perturbaciones suelen ser muy pequeñas y no dan lugar a variaciones macroscópicas detectables. Sin embargo, este hecho pone de manifiesto el carácter *ideal* del estado de equilibrio de un sistema.

Los estados de equilibrio se pueden parametrizar macroscópicamente mediante magnitudes definidas a tal efecto, como es el caso de la temperatura, y que en ocasiones pierden su significado en sistemas *fuera del equilibrio*. Estos sistemas no se comportan globalmente de forma estacionaria, siendo necesario estudiarlos microscópicamente para obtener información macroscópica sobre ellos. El modo de hacerlo conlleva necesariamente la aplicación del *principio del balance detallado* para la descripción del intercambio energético involucrado en los procesos microscópicos. Uno de estos sistemas fuera del equilibrio es el que trataremos a lo largo de esta parte de la Tesis: un gas molecular en expansión supersónica.

8.1. Tipos de colisiones

La evolución temporal de los gases viene determinada microscópicamente por las colisiones entre sus partículas. Dependiendo de la energía de las colisiones, el gas se comporta de un modo u otro. Por lo tanto, procede exponer una clasificación de los tipos de colisiones con el fin de aclarar qué tipo de fenómenos estamos tratando y cuál es el objetivo perseguido en el estudio desarrollado en esta Tesis. A partir de ahora consideraremos que los sistemas en colisión son moléculas, englobando a un tiempo a sistemas más simples como son los átomos.

Supongamos un proceso colisional elemental entre dos moléculas A y B del tipo



donde los índices i, j, l y m representan los estados cuánticos de las moléculas en colisión, antes y después de ésta. En estas condiciones, es posible clasificar las colisiones en dos tipos principales:

- las *elásticas*, en las que no hay transferencia de energía traslacional a los grados de libertad internos moleculares ($i = l, j = m$), y
- las *inelásticas*, donde la propia colisión produce transiciones moleculares ($i \neq l, j = m$; $i = l, j \neq m$; $i \neq l, j \neq m$).

Dentro de las inelásticas podemos distinguir:

- las *térmicas* o *no reactivas*, que producen transiciones (rotacionales puras, rovibracionales o electrónicas en especies moleculares) pero dejan intacta la estructura interna, y
- las *reactivas*, que dan lugar a reacciones químicas e incluso a la disociación en el caso molecular (*disociativas*). Nótese que las colisiones reactivas disociativas son colisiones en las que hay al menos una molécula y que producen en ella una transición electrónica a un estado no enlazante.

A lo largo de esta Tesis trataremos únicamente las colisiones inelásticas térmicas que afectan únicamente a los estados rotacionales moleculares, ya que la temperatura cinética del gas estudiado es menor de 100 K.

8.2. La ecuación de Boltzmann

Ludwig E. Boltzmann propuso su famosa ecuación en 1872 para tratar de explicar el comportamiento de las partículas que forman los gases desde el punto de vista microscópico. Para ello, utilizó razonamientos sencillos. La Física Estadística ha demostrado que, si bien sus razonamientos le llevaron a un resultado inexacto, la aproximación es lo suficientemente buena como para tratar con bastante completitud un tema tan complejo como éste (Balescu, 1975).

En el momento en el que Boltzmann desarrolló su teoría se sabía que los gases estaban formados por partículas pero no que poseían estructura interna. Por lo tanto, consideró que no la tenían y que se movían libremente hasta interactuar con otra partícula cercana mediante un potencial repulsivo de corto alcance $V(r)$. Boltzmann supuso un gas diluido donde las colisiones entre tres o más partículas a un tiempo fueran improbables y pudieran ser despreciadas. En consecuencia, la evolución temporal del gas procedía de dos fuentes bien diferenciadas: el movimiento libre de cada una de las partículas y las colisiones entre pares de ellas.

La evolución temporal de un fluido sin interacción y no sometido a ningún campo de fuerza externo viene dada por la *ecuación de Euler* (Kundu, 1990),

$$\frac{\partial A(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla A(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = 0, \quad (8.1)$$

donde $A(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ puede ser cualquier magnitud física relacionada con el fluido incluida la función de distribución de velocidades $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ ¹. Esta ecuación indica que las magnitudes físicas de los fluidos ideales varían únicamente por la deformación del propio fluido.

Tomando $A(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, introduciendo en la ecuación un término de ganancias G y otro de pérdidas L y reescribiendo se obtiene que:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) - L(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (8.2)$$

Inicialmente, estos nuevos términos están relacionados con fenómenos no especificados aunque distintos a la propia deformación del fluido.

Los términos G y L que representan las colisiones entre las partículas del gas pueden ser determinados realizando algunas aproximaciones. En el proceso colisional ideal, el potencial $V(r)$ de interacción entre las partículas en colisión tiene un alcance máximo, r_c , que supondremos mucho menor que la longitud característica de cualquier perturbación existente en el medio. Cuando dos partículas se encuentran a una distancia menor que r_c

¹La función de distribución de velocidades representa el número de partículas existentes en un entorno del punto \mathbf{r} , y en el intervalo de tiempo $(t, t + dt)$ y con velocidad en el intervalo $(\mathbf{v}, \mathbf{v} + d\mathbf{v})$.

interaccionan repeliéndose y su velocidad cambia durante el tiempo que tardan en escapar de la esfera de acción del potencial $V(r)$. Mediante este mecanismo, una partícula que inicialmente tiene una velocidad \mathbf{v} puede cambiar su velocidad a \mathbf{v}' . El periodo de tiempo que dura la colisión, t_c , es muy breve pero no nulo.

Después de un número suficiente de colisiones la función de distribución cambia significativamente. Al tiempo característico necesario para ello se le llama *tiempo de relajación*, t_r . La deducción de los términos de pérdidas y ganancias colisionales requiere que la unidad de tiempo considerada (Δt) sea lo suficientemente pequeña como para muestrear bien la variación de la función de distribución y lo suficientemente grande como para poder deducir estadísticamente el número de colisiones existentes en un volumen del gas dado ($t_r \gg \Delta t \gg t_c$).

El número de partículas con velocidad \mathbf{u} que colisionan con una partícula con velocidad \mathbf{v} según un parámetro de impacto b es $g\Delta t 2\pi b db f(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) d\mathbf{u}$, donde g es el módulo del vector *velocidad relativa* o *velocidad de colisión*, $\mathbf{g} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$. Integrando en b y \mathbf{u} , y multiplicando esa cantidad por el número de partículas con velocidad \mathbf{v} , se obtiene el número total de colisiones sufridas por las partículas con velocidad \mathbf{v} :

$$\int d\mathbf{u} \int db f(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) 2\pi g b d\mathbf{v} \Delta t = L d\mathbf{v} \Delta t. \quad (8.3)$$

Como en cada colisión ambas partículas cambian de velocidad, esta cantidad es la de partículas que dejan de tener una velocidad en el intervalo $(\mathbf{v}, \mathbf{v} + d\mathbf{v})$ a causa de las colisiones sufridas durante el periodo de tiempo Δt , es decir, el término $L d\mathbf{v} \Delta t$ de pérdidas buscado.

Igualmente podemos calcular el término de ganancia G :

$$\int d\mathbf{u}' \int db f(\mathbf{r}, \mathbf{u}', t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) 2\pi g' b d\mathbf{v}' \Delta t = G d\mathbf{v}' \Delta t. \quad (8.4)$$

Es posible demostrar que $d\mathbf{v} d\mathbf{u} = d\mathbf{v}' d\mathbf{u}'$ puesto que \mathbf{u} y \mathbf{v} están relacionados con \mathbf{u}' y \mathbf{v}' mediante una *transformación canónica*². Los módulos de las velocidades g' y g son iguales puesto que las colisiones son elásticas y se conserva la energía. Por lo tanto, la Ec. 8.2 queda así:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = C[f](\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (8.5)$$

que es la *ecuación de Boltzmann*, donde C es el *operador de colisión* que se define mediante:

$$C[f](\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int d\mathbf{u} \int db 2\pi g b [f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) f(\mathbf{r}, \mathbf{u}', t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)]. \quad (8.6)$$

Es posible reescribir el operador C de la forma:

$$C[f](\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int d\mathbf{u} \int d\Omega g \sigma_d(\Omega, \mathbf{g}, \mathbf{g}') [f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) f(\mathbf{r}, \mathbf{u}', t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)], \quad (8.7)$$

donde en vez del parámetro de impacto se utiliza la *sección eficaz diferencial de colisión*, $\sigma_d(\Omega, \mathbf{g}, \mathbf{g}')$, con $\Omega = (\theta, \phi)$ y θ y ϕ las coordenadas angulares esféricas, habiéndose elegido el sistema de coordenadas con el eje z paralelo a la línea de colisión. La ventaja que tiene esta última formulación del operador C es que expresa una relación directa entre el caso clásico y el caso cuántico.

8.3. Formulación cuántica de la ecuación de Boltzmann. La ecuación de Waldmann-Snider

La formulación simplificada de Boltzmann no es válida para partículas con estructura interna excitables a temperaturas $\simeq 300$ K, como es el caso de moléculas con diferencias

²Una transformación canónica es aquella en la que se mantienen invariantes las ecuaciones de Hamilton y, en consecuencia, la matriz jacobiana de la transformación.

energéticas entre niveles rotacionales adyacentes pequeñas ($2\beta B = 169.96$ K para el H_2 , $\beta = hc/k_B = 1.4388$ K cm^{-1} , Jennings et al. 1984). En moléculas grandes se producen incluso transiciones rovibracionales a temperatura ambiente, como en el caso del C_8H_2 , cuya energía vibracional del modo ν_{17} es $\simeq 89.2$ K (Capítulo 2). Por lo tanto, es necesario reformular la teoría de Boltzmann para incluir los grados de libertad internos, posibilitando así la transferencia energética entre estos y los de traslación.

Esta reformulación viene de la mano de Waldmann (1957) y Snider (1960) con la llamada *ecuación de Waldmann-Snider (WS)*. Los autores estudian la evolución de la función de distribución de las partículas que se mueven con velocidad en el intervalo $(\mathbf{v}, \mathbf{v} + d\mathbf{v})$ y están en un estado interno i en el instante de tiempo t . La ecuación resultante es la misma que la ecuación de Boltzmann pero con un operador de colisión distinto que tiene en cuenta el estado interno de las moléculas y su degeneración:

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = C_{WS}[f_i](\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (8.8)$$

El operador de colisión para moléculas lineales en el caso rotacional es (Waldmann, 1958):

$$C_{WS}[f_i](\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \sum_{jlm} \int d\mathbf{u} \int d\Omega g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\Omega, \mathbf{g}, \mathbf{g}') \times \left[f_l(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) f_m(\mathbf{r}, \mathbf{u}', t) \frac{(2i+1)(2j+1)}{(2l+1)(2m+1)} - f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f_j(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) \right], \quad (8.9)$$

donde los identificadores de los niveles (i, j, l y m) son los números cuánticos rotacionales correspondientes (J_i, J_j, J_l y J_m). Por razones de agilidad en la escritura y claridad en la lectura, mantendremos la anterior asignación a lo largo del resto del texto. Es necesario decir que Rabitz & Lam (1975) presentan la Ec. 8.9 de forma errónea, incluyendo el término $(2l+1)(2m+1)/(2i+1)(2j+1)$ en lugar de $(2i+1)(2j+1)/(2l+1)(2m+1)$ (ver Apéndice B.2).

La sección eficaz $\sigma_{ij \rightarrow lm}(\theta, \phi, \mathbf{g}, \mathbf{g}')$ representa la probabilidad de que se produzca la colisión inelástica (ver Sección 8.1):

$$A(i, \mathbf{v}) + B(j, \mathbf{u}) \longrightarrow A(l, \mathbf{v}') + B(m, \mathbf{u}'), \quad (8.10)$$

si A y B son las moléculas que participan en la colisión. Éstas están inicialmente en los estados internos i y j y pasan a los estados l y m a causa de la transferencia de energía traslacional durante la colisión. En el caso de que A y B sean moléculas idénticas, la colisión pasa a ser:

$$A(i, \mathbf{v}) + A(j, \mathbf{u}) \longrightarrow \begin{cases} A(l, \mathbf{v}') + A(m, \mathbf{u}') \\ A(m, \mathbf{v}') + A(l, \mathbf{u}') \end{cases}. \quad (8.11)$$

8.4. El potencial intermolecular y las secciones eficaces de colisión

La versión cuántica de la ecuación de Boltzmann necesita de la determinación de las secciones eficaces de colisión cuánticas, $\sigma_{ij \rightarrow lm}$. Generalmente, al estudiar cuánticamente sistemas tan complejos como son las moléculas, se tiende a simplificar el problema. Las dificultades que se plantean en los desarrollos matemáticos muchas veces fuerzan a elegir potenciales intermoleculares excesivamente sencillos para poder contrastar la teoría con los experimentos a través de cálculos numéricos (Zarur & Rabitz, 1974; Rabitz & Lam, 1975; van der Avoird et al., 1986; Green, 1993). Estas simplificaciones introducen incertidumbres en los cálculos de la evolución temporal de los gases moleculares, ya que las secciones eficaces de colisión nivel a nivel son muy sensibles al potencial intermolecular elegido (Ramaswamy et al., 1977).

Los primeros pasos en la determinación de las secciones eficaces de colisión en función de la *superficie de energía potencial intermolecular* (PES) y el papel que desempeña en los procesos colisionales se deben a [Gioumouis & Curtiss \(1958\)](#). Formularon la teoría cuántica de la dispersión entre partículas con estructura interna considerando su naturaleza bosónica o fermiónica, aunque sin tener en cuenta la estadística de espín. Este vacío lo cubrió [Takayanagi \(1965\)](#) al considerar colisiones entre moléculas formadas por átomos con espines distintos de cero (además de la característica bosónica y fermiónica de las moléculas). Posteriormente, [Huo & Green \(1996\)](#) estudiaron las colisiones entre moléculas idénticas (como es el caso del N_2) derivando valores numéricos para $\sigma_{ij \rightarrow lm}$. Para ello tomaron el sistema en colisión como una única función de onda simétrica para moléculas idénticas, manteniendo la simetría durante todo el proceso.

La gran sensibilidad de las secciones eficaces de colisión a la PES junto con un conocimiento preciso de la relación existente entre las colisiones moleculares y las secciones eficaces de colisión, permiten valorar PESs basadas en información experimental al comparar los valores experimentales de ciertos parámetros de un gas con los obtenidos por simulaciones numéricas.

8.5. Las tasas de transferencia colisional nivel a nivel. La ecuación maestra (MEQ)

La corrección de las PESs a partir de información experimental requiere de la utilización de parámetros observables experimentalmente relacionados con las secciones eficaces de colisión. Estos parámetros son las llamadas *tasas de transferencia colisional nivel a nivel*, $k_{ij \rightarrow lm}$. En lo sucesivo usaremos simplemente el nombre de *tasas de transferencia* o *tasas* para agilizar la lectura.

Suponiendo un sistema gaseoso en equilibrio termodinámico a una temperatura cinética T , la frecuencia a la que una partícula en un estado interno i se excita/desexcita a otro estado distinto l al colisionar con otra partícula en el estado j que se excita/desexcita a otro estado m , es $n P_j k_{ij \rightarrow lm}(T)$, donde P_j es la población de partículas en el estado interno j y n es la densidad numérica del gas. Por otro lado, el ritmo al que una partícula en el estado interno i se excita/desexcita a *cualquier* estado distinto l tras colisionar con una partícula en *cualquier* estado j , que se excita/desexcita a *cualquier* estado distinto m , es $n \sum_{jlm} P_j k_{ij \rightarrow lm}(T)$.

Utilizando estas frecuencias de excitación/desexcitación colisional la ecuación de evolución para las poblaciones de los niveles rotacionales en un gas de moléculas distinguibles es ([Rabitz & Lam, 1975](#)):

$$\frac{dP_i}{dt} = n \sum_{jlm} [-P_i P_j k_{ij \rightarrow lm} + P_l P_m k_{lm \rightarrow ij}] \quad (8.12)$$

que es la llamada *ecuación maestra* (MEQ). Para el caso de un gas de moléculas indistinguibles, la MEQ se transforma en ([Rabitz & Lam, 1975](#)):

$$\frac{dP_i}{dt} = n \sum_{j,l \leq m} [-P_i P_j k_{ij \rightarrow lm} + P_l P_m k_{lm \rightarrow ij}] Q_{ijkl} \quad (8.13)$$

con

$$Q_{ijkl} = [1 + \delta_{ij} (1 - \delta_{li}) (1 - \delta_{mi})] [1 - \delta_{li} (1 - \delta_{ij})] [1 - \delta_{mi} (1 - \delta_{ij})]. \quad (8.14)$$

Es posible demostrar que la ecuación de Waldmann-Snider (Ec. 8.8) es prácticamente equivalente a la ecuación maestra (Apéndice B.2) si la expresamos en un sistema de referencia que se mueva y deforme con el fluido y con las tasas de transferencia definidas como

$$k_{ij \rightarrow lm}(T) = \frac{\langle v \rangle}{(k_B T)^2} \int_{E_s}^{\infty} dE E \sigma_{ij \rightarrow lm}(E) e^{-E/k_B T}, \quad (8.15)$$

donde $\langle v \rangle$ es el promedio del módulo de la velocidad de colisión, T la temperatura cinética del gas, E la energía cinética de la colisión ($E = E_{\text{Total}} - E_i - E_j$) y E_s la energía mínima colisional a partir de la cual la colisión se hace inelástica.

Estas tasas de transferencia se obtienen promediando las secciones eficaces diferenciales de colisión con una distribución de velocidades maxwelliana (Apéndice B.3). En consecuencia, están promediadas en velocidades (energías) y en las variables angulares. Utilizar una función de distribución maxwelliana para promediar las secciones eficaces es una aproximación razonable en tanto en cuanto la función de distribución del sistema sea similar a la primera. En el caso de no ser así, los resultados obtenidos con la MEQ divergirían de los obtenidos con la ecuación WS, pues estas ecuaciones ya no serían aproximadamente equivalentes (Apéndice B.2).

Utilizando el principio del balance detallado, es posible demostrar que, para el caso de excitaciones/desexcitaciones colisionales rotacionales (con los estados iniciales y finales electrónicos y vibracionales iguales):

$$k_{lm \rightarrow ij} = k_{ij \rightarrow lm} \frac{(2i+1)(2j+1)}{(2l+1)(2m+1)} e^{(E_l + E_m - E_i - E_j)/k_B T}. \quad (8.16)$$

Según sea T , el término exponencial puede producir diferencias de muchos órdenes de magnitud entre las tasas *directa*, $k_{ij \rightarrow lm}$, e *inversa*, $k_{lm \rightarrow ij}$. Sin embargo, las tasas de transferencia que representan transiciones con pérdidas globales de energía, donde la suma de las energías de los estados iniciales es mayor que la de los estados finales, tiene comportamientos mucho más suaves con T (Montero et al., 2006). Por ello su uso es más conveniente.

8.6. Antecedentes de la determinación de las tasas de transferencia colisional

Desde hace varias décadas se ha intentado obtener información microscópica sobre los procesos colisionales en los gases, con poco éxito. La gran dificultad de *observar* estos procesos directamente a través de experimentos ha llevado a tratar de obtener información de modo indirecto mediante el estudio de magnitudes de muy difícil interpretación.

En prácticamente todas las investigaciones previas, se ha supuesto que las tasas de transferencia colisional representan colisiones entre dos moléculas donde una de ellas no cambia de estado energético durante la colisión. Estas son las llamadas *tasas reducidas* y únicamente dependen de los niveles inicial y final de la molécula que sufre las transiciones. Estas tasas no son verdaderas magnitudes moleculares puesto que están sumadas sobre las poblaciones moleculares, que dependen de la *temperatura rotacional del medio*. Este promedio considera muchos procesos colisionales a un tiempo proporcionando tasas poco realistas.

Sin embargo, ahora es posible obtener medidas precisas y fiables de magnitudes directamente relacionadas con las colisiones moleculares, aunque de interpretación también compleja (ver Capítulos 10 y 11).

A continuación se exponen brevemente los métodos experimentales empleados en el estudio de la relajación rotacional y las colisiones moleculares. Posteriormente, se repasan las investigaciones realizadas sobre este tema desde los años 60 para proporcionar al lector una visión global del problema y sus avances hasta la actualidad.

8.6.1. Métodos y técnicas

La obtención de los datos experimentales requeridos para el estudio de las tasas de transferencia colisional ha venido dada a través de la utilización de ciertos métodos experimentales. Estos métodos son:

- acústicos,
- espectroscópicos, y

- de haces moleculares.

A continuación se exponen dichos métodos y sus ventajas e inconvenientes en el estudio experimental de la relajación rotacional.

8.6.1.1. Los métodos acústicos

Los métodos acústicos utilizan la transferencia de energía entre los grados de libertad traslacionales y los internos moleculares de un gas para obtener información experimental sobre las tasas de transferencia colisional. Dos de las técnicas que emplean este método son:

- *Absorción/dispersión ultrasónica.*— Durante la propagación de una onda sonora en un gas se produce una atenuación en la intensidad de la onda al ser absorbida parte de su energía mecánica por las moléculas del gas. El coeficiente de absorción depende del tipo de moléculas que formen el gas y de sus tasas de transferencia. Las variaciones de intensidad de la onda pueden ser detectadas con gran precisión proporcionando datos de calidad. Los modelos teóricos utilizados para extraer la información de las tasas de transferencia de los coeficientes de absorción son bien conocidos y el acuerdo entre estos y los datos experimentales muy bueno. Únicamente es posible obtener información sobre las tasas de transferencia cuando el número de éstas involucradas en la relajación es pequeño. Cuando no es así, la información obtenida está promediada. Debe aplicarse en gases en estático. (Jonkman et al., 1968; Prangma et al., 1972).
- *Espectroscopía fotoacústica.*— La incidencia de un pulso de radiación láser con una frecuencia determinada sobre una región de una muestra gaseosa viene acompañada de la absorción de parte de esta radiación por la región irradiada. Un porcentaje de la energía absorbida es transferida a los grados de libertad traslacionales dispersándose por el resto de la muestra. Esta transferencia genera una onda sonora en el gas, pudiendo ser detectada y cuantificados su intensidad y el coeficiente de absorción del medio. Su principal desventaja es que la teoría es bastante complicada y debe aplicarse a gases en estático. Sin embargo, es muy sensible y su rango dinámico es de varios órdenes de magnitud. El montaje experimental es sencillo (Sigrist, 2000).

8.6.1.2. Los métodos espectroscópicos

Estos métodos aprovechan el espectro de la radiación emitida o dispersada en las desexcitaciones radiativas de moléculas excitadas por varios procedimientos. El estudio cuantitativo de los espectros registrados permite obtener, entre otras cosas, la anchura de dichas líneas y las poblaciones de los niveles moleculares. Hay tres tipos métodos espectroscópicos que resultan de utilidad en el estudio de la relajación rotacional y la determinación de tasas de transferencia:

- *Ensanchamiento de línea.*— La componente de la anchura de las líneas espectrales de un gas debida a la presión contiene información acerca de las colisiones que se producen en ese gas. Estas medidas se pueden interpretar en términos de tasas de transferencia (p.e., Gómez et al., 2007). Las técnicas utilizadas en este método deben proporcionar perfiles de línea precisos para obtener medidas de calidad.
- *Pump-probe.*— Se utiliza un mecanismo de bombeo para excitar las moléculas de un gas en combinación con otro mecanismo que testa el cambio de las poblaciones en el tiempo. Por lo tanto, puede utilizarse con buenos resultados en la estimación de las tasas de transferencia reducidas (Sitz & Farrow, 1990). La combinación de dos técnicas distintas en un mismo montaje lo complica significativamente. La interpretación de los datos depende de las técnicas utilizadas.

- *Diagnóstico de expansiones supersónicas.*— La propia evolución de las moléculas de un gas en expansión supersónica supone la aparición de efectos de relajación. La aplicación de técnicas no intrusivas de caracterización de gases proporciona información acerca de las poblaciones moleculares y la distribución de velocidades del gas en diferentes regiones de la expansión. Es posible estimar magnitudes como el tiempo de relajación rotacional o las tasas de transferencia colisional. Aunque las expansiones son muy fáciles de generar y muy estables, los intensos gradientes de temperatura y densidad existentes en el flujo hacen necesario el uso de técnicas con gran resolución espacial para obtener información precisa.

Hay diversas técnicas que utilizan estos métodos, diferenciándose principalmente en la forma de excitar las moléculas de la muestra. Algunas de ellas son:

- *Espectroscopía Raman lineal (RS).*— Con un láser con frecuencia mucho mayor a las de las transiciones a observar se excitan las moléculas del gas (ver Capítulo 10.1.1; [Silveira & Tommasini, 1976](#); [Luijks et al., 1981](#)). Las intensidades del espectro obtenido son proporcionales a la densidad de partículas emisoras, dotando a esta técnica de una gran sensibilidad. Posee suficiente resolución espectral ($\sim 0.1 \text{ cm}^{-1}$). La resolución espacial está limitada por la anchura mínima del haz láser.
- *Fluorescencia inducida por haz de electrones (EBF).*— Las moléculas son excitadas a estados electrónicos superiores con un haz de electrones con energías de 10 – 20 keV ([Muntz, 1962](#)). Esta técnica es apropiada para el estudio de gases en expansiones supersónicas o en medios gaseosos enrarecidos. La resolución espacial alcanzada viene limitada por la anchura del haz incidente. La fluorescencia es muy intensa pero es necesario utilizar modelos complejos de desexcitación para interpretar los datos. Durante la excitación molecular aparecen electrones secundarios de difícil tratamiento, que pueden modificar los resultados.
- *Fluorescencia inducida por láser (LIF).*— Esta técnica es similar a la EBF pero utiliza un láser como mecanismo de bombeo ([Levy, 1980](#)). La resolución espacial alcanzada es mayor que en el caso de la EBF.
- *Espectroscopía coherente Raman anti-Stokes (CARS).*— La técnica utiliza dos haces láser para excitar una región de la muestra gaseosa: uno de frecuencia fija y otro de frecuencia sintonizable. La acción de ambos láseres da lugar a una radiación dispersada varios órdenes de magnitud más intensa que la radiación dispersada Raman espontánea y con una resolución espectral muy grande ($\sim 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$). La señal CARS depende de la temperatura reduciéndose conforme ésta disminuye ([Huber-Wälchli et al., 1979](#)). La sensibilidad es similar a la de la técnica RS pero sólo se puede estudiar un intervalo de frecuencias de unos pocos cm^{-1} a un tiempo, y presenta problemas de interferencia no lineal entre líneas próximas.
- *Espectroscopía Raman inversa (IRS)/de ganancia Raman estimulada (SRGS/SRS).*— Los dos métodos son prácticamente iguales. Se utilizan dos láseres con frecuencias distintas, teniendo uno de ellos un ancho de banda grande. La muestra gaseosa absorbe la radiación de este último láser. La radiación del otro es dispersada dando lugar a espectros muy intensos debido a la adición de la radiación emitida por las moléculas que se desexcitan. La técnica es no lineal siendo difícil relacionar la intensidad de la señal con el número de moléculas emisoras. Carece de resolución espacial ([Owyong et al., 1978](#); [Valentini, 1980](#)).
- *Ionización multifotónica por incremento de la resonancia (REMPI).*— Utilizando fuentes de radiación muy intensas se induce a las moléculas de la muestra a absorber dos fotones a un tiempo, quedando ionizadas. Del estudio de los espectros de los iones generados se obtiene información cuantitativa del gas neutro antes de la ionización.

Esta técnica es muy sensible pero el análisis de los espectros es una labor compleja. Suele utilizarse con muestras enrarecidas, proporcionando únicamente información acerca de las condiciones terminales en expansiones supersónicas (Aoiz et al., 1999).

8.6.1.3. Haces moleculares

En este método se utilizan haces moleculares generados seleccionando una región pequeña en torno al eje de una expansión obteniendo un haz de moléculas. Con estos haces se pueden realizar múltiples experimentos, desde estudios poblacionales hasta reacciones químicas. En especial, es interesante la aplicación a la determinación de las poblaciones y la distribución de velocidades de las moléculas del gas. Utilizando técnicas de excitación molecular (máseres, láseres infrarrojos, EBF, etc.) se puede determinar el tiempo característico de relajación colisional e, incluso, estimar las tasas de transferencia reducidas utilizando modelos teóricos (p.e., Gough & Miller, 1982).

La interpretación de los datos experimentales se ha tratado de hacer frecuentemente comparando con resultados numéricos generados por diferentes métodos. El estudio de las tasas de transferencia colisional presentado en esta Tesis es prácticamente experimental. Por lo tanto, aunque se presentan varios métodos teóricos, únicamente es necesario incluir una introducir para el método CC (ver Capítulo 11).

Los métodos más comúnmente utilizados son:

- *Método de los canales acoplados (CC).*– Este método se basa en la descomposición de la función de onda total de las moléculas en colisión en una suma de armónicos esféricos. Los pares de coordenadas angulares marcan la dirección de cada una de las dos moléculas con respecto al centro de masas del sistema. Utilizando esta descomposición, la ecuación de Schrödinger para el sistema se transforma en un sistema infinito de ecuaciones diferenciales acopladas, donde la única variable es la distancia entre las moléculas. Puesto que solo se ha hecho un desarrollo en serie de la función de onda, la consideración de todos los términos de la suma proporciona la solución del problema, siendo posible dar una aproximación truncando la serie (Arturs & Dalgarno, 1960). Por lo tanto, este método está considerado como *exacto*.
- *Método de los estados acoplados (CS,* McGuire & Kouri, 1974),
- *aproximación semiclásica centrífuga repentina (SCS,* Belikov et al., 1989),
- *método semiclásico de los estados estacionarios perturbados (PSS,* Jolicard & Bonamy, 1983),
- *aproximación súbita de orden infinito (IOS,* Goldflam et al., 1977),
- *formalismo de la corrección súbita de energía (ECS,* DePristo et al., 1979), y
- *ley exponencial de la corrección súbita de energía (ECS-E,* Strekalov, 1995),

entre otros. Parte de estos métodos consideran cálculos numéricos desde primeros principios (CC, CS, PSS, IOS). El resto se engloban en las llamadas *leyes de escala* (Brunner & Pritchard, 1982), que proponen tasas de transferencia colisional calculadas con una cantidad reducida de información del sistema (ECS, SCS), y en las *leyes de ajuste*, en las que se propone una teoría basada en parámetros a ajustar relacionados con todas las tasas de transferencia y muy difíciles de interpretar (ECS-E).

8.6.2. Investigaciones anteriores

En la década de los años 60 se comienza el estudio experimental de los efectos macroscópicos de las colisiones moleculares en un gas para así estudiar las magnitudes microscópicas. Los primeros experimentos se basan en la determinación del tiempo de relajación

rotacional o la sección eficaz de relajación rotacional promediados en el volumen de gas considerado (Holmes et al., 1962). La determinación experimental de las poblaciones rotacionales viene de la mano de Muntz (1962) al proponer el estudio microscópico de gases mediante la fluorescencia por haz de electrones (EBF). Gracias a esta técnica, Robben et al. (1966) son capaces de medir la función de distribución rotacional del N_2 en expansiones realizadas en túneles de viento. La temperatura rotacional del gas obtenida presenta errores $\simeq 3\%$ a $T_t = 280$ K, aumentando a temperaturas traslacionales menores. Utilizando el método acústico, Jonkman et al. (1968) y Prangma et al. (1972) investigan la relajación rotacional del para- H_2 y orto- H_2 , obteniendo los tiempos y las secciones eficaces características con errores $\lesssim 10\%$.

Un avance teórico importante sobre las colisiones moleculares lo da Green (1975) al tratar por vez primera los choques inelásticos entre moléculas de H_2 utilizando el método *close-coupling* (CC) y considerando las moléculas como indistinguibles. Por otro lado, Rabitz & Lam (1975) escriben un artículo clásico en el que describen teóricamente con la ayuda de la MEQ (Ec. 8.13) el comportamiento de las poblaciones rotacionales del H_2 al ser expandido supersónicamente. Los cálculos realizados con secciones eficaces calculadas analíticamente con un tratamiento semiclásico (Zarur & Rabitz, 1974) son compatibles con los escasos datos experimentales existentes en aquel momento (semicuantitativos), aunque con ciertas discrepancias.

Las medidas realizadas con la técnica EBF son explicadas teóricamente por Sharafutdinov & Skovorodko (1981) en el caso de expansiones de N_2 . Este trabajo sugiere que es necesario considerar una gran cantidad de niveles rotacionales para poder explicar la evolución de las poblaciones en la expansión. Los autores se dan cuenta de que no es posible obtener información sobre las tasas de transferencia de forma inequívoca si se consideran a un tiempo muchos niveles rotacionales (ver Capítulo 11).

Se desarrollan y aplican diferentes métodos de cálculo y leyes de escala para explicar los datos experimentales. Bonamy et al. (1988) utilizan el formalismo ECS para obtener información sobre tasas de transferencia efectivas nivel a nivel de la anchura de la rama Q del N_2 . Jolicard & Bonamy (1983) presentan y emplean el método PSS con resultados similares a los generados con el método CC a energías de colisión pequeñas. Belikov et al. (1989) ponen en práctica el método SCS para explicar los datos experimentales obtenidos con EBF en expansiones de una mezcla de N_2 y Ar, generando datos numéricos que describen la dependencia con la temperatura de los experimentales con diferencias de un factor $\simeq 2-3$.

Sitz & Farrow (1990) obtienen por primera vez medidas directas de la transferencia de energía rotacional entre los niveles rotacionales del N_2 en el estado vibracional $v = 1$, haciendo uso del método *pump-probe*. Para extraer de los datos experimentales la información sobre las tasas de transferencia reducidas de los datos experimentales, los autores realizan un ajuste por mínimos cuadrados utilizándolas como parámetros del ajuste. Concluyen que los resultados son compatibles con varios de los conjuntos generados con métodos semiclásicos y fenomenológicos (p.e., ECS).

Durante los siguientes años aparecen varios trabajos dedicados a intentar modelar diferentes conjuntos de datos experimentales utilizando diferentes métodos (IOS), leyes de escala (ECS), leyes de ajuste, y en ocasiones combinaciones de ellos (Temkin et al., 1991; Bonamy et al., 1991; Green, 1993; Belikov et al., 1994; Belikov & Sharafutdinov, 1995; Belikov et al., 1996; Sharafutdinov et al., 1996). Las comparaciones con los datos experimentales no siempre son razonables, estableciendo que la ley de escala ECS da buenos resultados y que la calidad de los datos numéricos depende mucho de la PES elegida.

Huo & Green (1996) plantean la teoría cuántica de las colisiones entre dos moléculas indistinguibles más realista hasta el momento. Demuestran que las secciones eficaces de colisión se pueden escribir como formadas por una contribución *directa*, donde no hay intercambio de moléculas, otra *de intercambio*, donde sí lo hay, y una contribución *de interferencia cuántica*, que suele ser despreciable. Calculan las secciones eficaces de colisión para el N_2 con diferentes métodos (CC, CS e IOS) utilizando la PES de van der Avoird et al.

(1986). Green & Huo (1996) utilizan los resultados obtenidos por Huo & Green (1996) con los métodos CC y CS para calcular las anchuras de línea del N_2 esperadas a temperaturas ambiente y menores con el método CARS y compararlas con resultados experimentales. Los valores calculados concuerdan con los experimentales a temperaturas próximas a la ambiente aunque empeoran paulatinamente conforme se reduce la temperatura.

Tejeda et al. (1996) presentan un montaje experimental para medir las condiciones físicas en expansiones supersónicas de gases moleculares utilizando la espectroscopía Raman (RS), basado en los trabajos de Silvera & Tommasini (1976). Ramos et al. (2002) utilizan una versión mejorada del montaje anterior para determinar las tasas de transferencia reducidas del N_2 entre 3 y 16 K directamente a partir de la MEQ (Ec. 8.13). La metodología seguida no utiliza ningún tipo de ley de escala ni ajuste para hallar los resultados. Maté et al. (2003) aplican el procedimiento anterior en expansiones mixtas de $He:N_2$. Estos autores obtienen las tasas de transferencia reducidas para las colisiones $He:N_2$ entre 3 y 20 K, utilizando los resultados del trabajo de Ramos et al. (2002). Por otro lado, se realizan cálculos numéricos con el método CC y la PES de Reid et al. (1997), existiendo un acuerdo razonable entre las tasas de transferencia experimentales y las calculadas. Continuando con la serie de experimentos, Maté et al. (2005) aplican de nuevo este método para determinar experimentalmente las tasas de transferencia del para- H_2 . Se obtiene información experimental de la tasa de transferencia (*no reducida*) $k_{00 \rightarrow 02}$ entre 2 y 110 K con un error promedio $\simeq 18\%$. También se realizan cálculos numéricos con el método CC y la PES de Diep & Johnson (2000). El acuerdo entre los datos experimentales y los numéricos es bueno, con desviaciones de los datos teóricos con respecto a los experimentales del 15 % a $\simeq 110$ K y del 50 % por debajo de 10 K.

Finalmente, con un montaje experimental y una metodología mejoradas, Montero et al. (2006) realizan el mismo experimento anterior para el H_2 (orto- H_2 y para- H_2). Obtienen las tasas de transferencia (*no reducidas*) entre 10 y 140 K. Este experimento demuestra que las colisiones en las que ambas moléculas sufren transiciones rotacionales no son en absoluto despreciables, siendo las causantes en un gran porcentaje de las variaciones sufridas por las poblaciones a lo largo de las expansiones (el proceso $30 \rightarrow 12$ es el segundo en importancia). Al mismo tiempo se realizan estudios numéricos de las colisiones $H_2:H_2$ con el método CC y utilizando una PES calculada *ab initio*. Las tasas de transferencia *no reducidas* calculadas numéricamente están dentro del intervalo de error de las experimentales para todas las temperaturas consideradas.

8.6.3. Resumen y conclusiones

A lo largo de estas últimas décadas se ha dedicado un gran esfuerzo a la comprensión del fenómeno de relajación rotacional en gases moleculares y a los fenómenos físicos emergentes. Sin embargo, parece que las tasas de transferencia colisional rotacional (ya sean del H_2 o del N_2) han eludido estos esfuerzos, siendo únicamente accesibles sin la utilización de leyes de escala o restricciones en las funciones de ajuste (Sitz & Farrow, 1990; Ramos et al., 2002; Maté et al., 2003, 2005; Montero et al., 2006). En el resto de los trabajos se han introducido de un modo u otro ayudas externas (teóricas) para la derivación de los datos buscados, sesgando los resultados. En cuanto a las investigaciones teóricas, se concluye que los resultados generados con el método CC no son en general reproducibles por ningún otro método, ley de escala o ley de ajuste.

La tendencia general ha sido la de obtener información sobre parámetros muy generales relacionados con los procesos colisionales, como el tiempo de relajación o el ensanchamiento de línea. Se han utilizado de forma generalizada las tasas de transferencia reducidas, considerando el hecho falso de que una de las dos moléculas implicadas en la colisión no sufre transiciones rotacionales. El trabajo de Montero et al. (2006) representa un logro experimental muy importante al permitir la determinación de las tasas de transferencia no reducidas del H_2 a temperaturas pequeñas y sin utilizar artificios externos al propio experimento.

El resto de esta Tesis está dedicado a exponer los resultados obtenidos durante la investigación realizada para la obtención de las tasas de transferencia nivel a nivel no reducidas del N_2 a temperaturas pequeñas (Fonfría et al., 2007) según la metodología expuesta en Montero et al. (2006).

Capítulo 9

Expansiones supersónicas

Como hemos visto en el Capítulo 8, la evolución de los sistemas fuera del equilibrio está completamente determinada por las interacciones a escala microscópica entre las partículas que forman estos sistemas. Esto implica que la evolución de los sistemas fuera del equilibrio es fuente potencial de datos experimentales relacionados con la estructura cuántica de átomos y moléculas.

El problema que se plantea es cómo obtener los datos experimentales adecuados y cómo extraer la información cuántica sobre las colisiones a partir de ellos.

El trabajo desarrollado en esta Tesis utiliza un gas expandido supersónicamente como sistema fuera del equilibrio. En este Capítulo veremos que este sistema puede proporcionar los datos buscados con la precisión necesaria como para permitir nuevos avances en la teoría cuántica de las colisiones.

9.1. Estructura y propiedades físicas de las expansiones supersónicas

La estructura de una expansión supersónica es la siguiente (Figura 9.1; [Maté et al., 2001](#); [Graur et al., 2004](#)):

- I. la *zona de silencio* (Figura 9.1b, zona azul),
- II. la *onda de choque normal* o *disco de Mach* (Figuras 9.1b y c, región paralela al eje de las ordenadas situada entre 60 y 70 R_e),
- III. la *onda de choque lateral* (Figura 9.1c, zona curva de color amarillento bordeada por regiones azules), y
- IV. la estela posterior al disco de Mach (Figuras 9.1b y c, más allá de 70 R_e).

De esta última región no veremos nada en esta Tesis por no influir en los estudios desarrollados.

9.1.1. La zona de silencio

La *zona de silencio* es la región de la expansión donde el flujo es supersónico y prácticamente isentrópico. Está contenida en la estructura cerrada formada por el disco de Mach y la onda de choque lateral (ver zona I en las Figuras 9.1a, b y c). La densidad en esta zona a lo largo del eje de la expansión varía como $\sim y^{-2}$ ([Rebrov, 1985](#)), siendo y la distancia a la boca de tobera. Esto implica una reducción de 4 órdenes de magnitud a una distancia de 100 diámetros de tobera de ésta (Figura 9.1c). Por otro lado, las temperaturas traslacional y rotacional pueden llegar a variar en 2 órdenes de magnitud (Figura 9.1b), dependiendo de las condiciones del experimento y de la molécula utilizada. La expansión es prácticamente

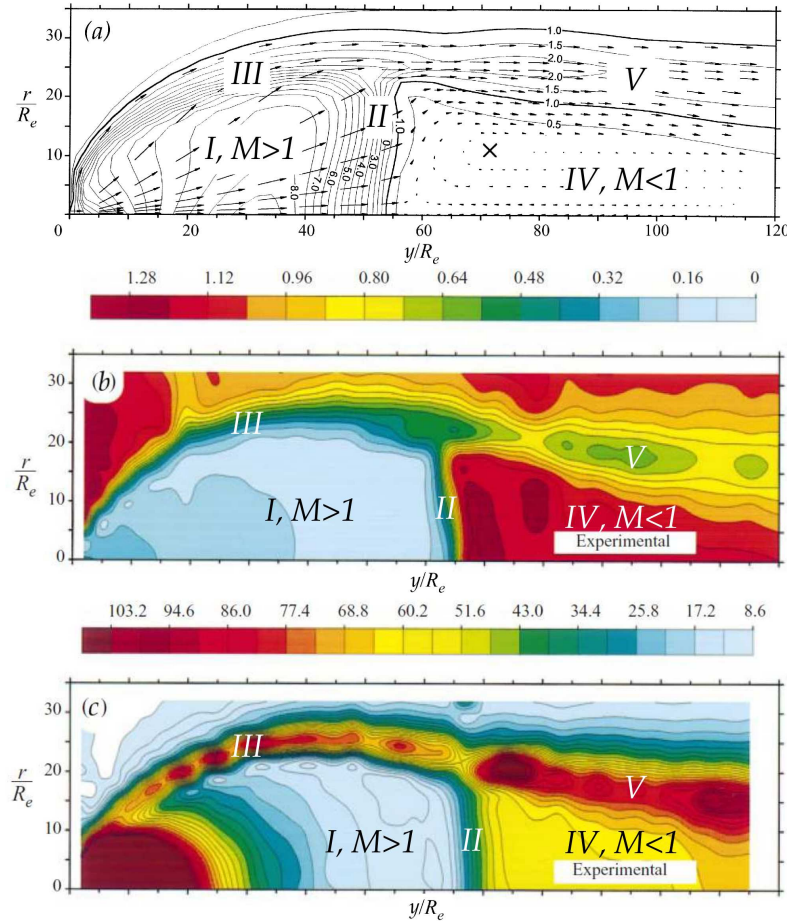


FIGURA 9.1.— Campo de velocidades, temperatura rotacional y densidad de una expansión supersónica genérica. Una expansión está formada por varias regiones con diferentes propiedades físicas: la zona de silencio (zona I) donde el flujo es supersónico ($M > 1$) está rodeada por la onda de choque lateral (zona III) y el disco de Mach (zona II). Las zonas IV y V forman la interacción entre el flujo expulsado a lo largo de la onda de choque lateral y el medio subsónico posterior al disco de Mach. (a) La Figura superior muestra el campo de velocidades existente en una expansión supersónica calculado numéricamente. La expansión del fluido en la zona de silencio es prácticamente radial. Cuando el flujo alcanza la onda de choque lateral es deflectado paralelamente al eje de la expansión. (b) La Figura intermedia representa un mapa experimental de temperaturas rotacionales de la misma expansión que la Figura superior. La zona de silencio es la más fría de toda ella. (c) La Figura inferior es un mapa experimental de densidades. La zona de silencio es la zona menos densa de toda la expansión. En las Figuras, R_e es el radio de la boca de la tobera, la temperatura está expresada en T_e y la densidad en $10^{-5}n_e$, donde T_e y n_e son la temperatura y la densidad numérica en la boca de tobera (Figura tomada de [Maté et al., 2001](#)).

radial ([Ashkenas & Sherman, 1965](#)) hasta alcanzar la onda de choque lateral donde el gas es deflectado hacia direcciones próximas a la del eje del sistema.

Conforme el gas se va expandiendo los intensos gradientes de densidad y temperatura (cinética y rotacional) disminuyen progresivamente. En un gas en expansión en un medio con presión no nula, dichas disminuciones están limitadas por el disco de Mach. En cambio, en una expansión en el vacío (p.e., expansiones producidas en el espacio por satélites) la densidad tiende asintóticamente a cero y las temperaturas a valores constantes no nulos.

En las regiones más alejadas de la tobera el equilibrio se rompe pudiéndose definir una temperatura traslacional paralela a las líneas de flujo y otra perpendicular a ellas (Hamel & Willis, 1966, ver Sección 9.3).

A raíz de los muchos experimentos realizados en expansiones supersónicas generadas por toberas de muy diversos tamaños y formas, se ha establecido que el comportamiento es *autosimilar*, es decir, que no depende de la escala de la estructura sino de las propiedades particulares de la tobera (Rebrov, 1985). La densidad en función de la distancia a la tobera a lo largo del eje del sistema, y , se puede expresar de la siguiente forma (ver Sección 9.2):

$$n(y) = n_0 \left[1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2(y) \right]^{-1/(\gamma - 1)}, \quad (9.1)$$

donde n_0 es un factor de escala, $\gamma = C_p/C_v$ es el coeficiente adiabático del gas, siendo C_p y C_v las capacidades caloríficas a presión y volumen constante ($C_v = 3R/2$ para un gas monoatómico, $C_v = 5R/2$ para uno diatómico y $C_p = R + C_v$, donde R es la constante universal de los gases), y M el número de Mach que depende de y . La dependencia de M con y , determinada empíricamente utilizando datos tomados en túneles de viento, viene dada por (Murphy, 1984; Miller, 1988):

$$M(y) = \left(\frac{y}{D} \right)^{\gamma - 1} \left(b + \frac{c}{y/D} + \frac{d}{(y/D)^2} + \frac{e}{(y/D)^3} \right), \quad (9.2)$$

donde D es el diámetro de la boca de la tobera y $y \geq D/2$. Es posible expresar las constantes b , c , d y e en función del coeficiente adiabático del gas γ (Miller, 1988; Tejeda et al., 1996):

$$\begin{aligned} b &= 16.5404 - 15.8215\gamma + 4.7018\gamma^2, \\ c &= -15.6286 + 15.1459\gamma - 3.7335\gamma^2, \\ d &= 13.1705 - 14.4312\gamma + 4.0591\gamma^2, \\ e &= -3.4116 + 3.7898\gamma - 1.0720\gamma^2. \end{aligned} \quad (9.3)$$

Considerando que las colisiones son demasiado débiles como para producir excitaciones vibracionales, la entropía a lo largo de una línea de corriente (S_{Total}) es aproximadamente igual a la suma de la entropía traslacional (S_t) y la rotacional (S_r) con

$$\begin{aligned} S_t &= S_t^0 + R \left[\frac{3}{2} \ln T_t(y) - \ln n(y) \right], \\ S_r &= S_r^0 + R \left[\ln Z(y) + T_r(y) \frac{\partial}{\partial T_r(y)} \ln Z(y) \right]. \end{aligned} \quad (9.4)$$

En estas expresiones Z es la función de partición rotacional, n la densidad, T_t la temperatura traslacional, T_r la rotacional y $R = 8.3145 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ la constante universal de los gases. Aplicando la condición de isentropía ($S_{\text{Total}}(y) = \text{cte}$) se obtiene la siguiente expresión para la temperatura traslacional, T_t (Montero et al., 2006, Apéndice B.1):

$$T_t(y) = T_0 \left\{ \frac{n(y)}{n_0} \prod_J \frac{[P_J(y)/g_J(2J+1)]^{P_J(y)}}{[P_J^0/g_J(2J+1)]^{P_J^0}} \right\}^{2/3}, \quad (9.5)$$

donde P_J es la población del nivel rotacional asociado al número cuántico rotacional J , g_J es la degeneración de ese nivel, T_0 y n_0 son la temperatura y la densidad de estancamiento y P_J^0 la población del nivel rotacional J en estas últimas condiciones.

Para gases compuestos por moléculas con constantes rotacionales significativamente menores que la energía térmica del gas, es posible utilizar la aproximación clásica a la función de partición rotacional $Z \simeq T_r/\beta B$, donde $\beta = hc/k_B = 1.4388 \text{ cm K}$ y B es la

constante rotacional de la molécula considerada. La temperatura traslacional calculada de este modo toma la forma

$$T_t(y) \simeq T_0 \left[\frac{T_0}{n_0} \frac{n(y)}{T_r(y)} \right]^{2/3}. \quad (9.6)$$

El error de esta aproximación con respecto a la Ec. 9.5 para el N_2 es $< 2.5\%$ si $T_t > 6.5$ K ($B(N_2) \simeq 1.99 \text{ cm}^{-1} \simeq 2.86$ K, [Bendtsen 1974](#)).

9.1.2. El disco de Mach y la onda de choque lateral

El *disco de Mach* (ver Figura 9.1; región II) es una región aproximadamente perpendicular al flujo en la zona de silencio en la que el flujo pasa de supersónico a subsónico incrementándose la presión en dos órdenes de magnitud. Su anchura es de varios recorridos libres medios de las partículas del gas ([Mott-Smith, 1951](#); [Ramos et al., 2000](#), ver Capítulo 11).

La posición del disco de Mach y su anchura, y_M y x_M , vienen determinadas aproximadamente por las siguientes expresiones fenomenológicas ([Ashkenas & Sherman, 1965](#)):

$$\begin{aligned} y_M &= 0.67D \sqrt{\frac{P_0}{P_r}}, \\ x_M &\simeq 0.5y_M, \end{aligned} \quad (9.7)$$

donde P_0 es la *presión de estancamiento* del gas expandido y P_r es la *presión residual*, definida como la presión del gas que rodea a la expansión.

La *onda de choque lateral* es la región de transición del flujo supersónico existente en la zona de silencio al entorno subsónico que rodea a la expansión (ver Figura 9.1; región III). El gas expandido que llega a la onda de choque lateral es deflectado en la dirección paralela al eje de la expansión (ver Figura 9.1a). En este proceso, el módulo de la velocidad del gas se reduce ligeramente produciéndose una retermalización paulatina en la dirección radial. La mayor parte del momento lineal y la masa asociados a la expansión se transmiten a través de esta estructura. Experimentalmente se observa que la anchura máxima de la zona de silencio es de $\simeq 0.75y_M$ ([Tejeda et al., 1996](#)).

9.1.3. Influencia de la geometría de la tobera en la expansión

Las propiedades y la evolución de una expansión generada a través de una tobera dada dependen de su forma y su estructura, siendo las axialmente simétricas las más utilizadas. No obstante, a pesar de que la simetría de la tobera determina las características de la expansión, también lo hace dentro de cada simetría la *geometría de la boca de tobera y de las zonas anteriores a ella* en la dirección de la expansión. La geometría de los últimos tramos de una tobera determina la forma de la *superficie sónica* ($y = 0$), es decir, la zona geométrica del espacio donde $M = 1$ y que supone el origen de la expansión. La superficie sónica influye ampliamente en la evolución de la expansión cerca de la boca de tobera, donde los gradientes son más intensos. Experimentalmente, se observa que esta influencia va disminuyendo conforme el gas evoluciona en la expansión y se acerca al disco de Mach.

9.2. Teoría clásica de las expansiones supersónicas

La Dinámica de fluidos permite caracterizar el gas en la zona de silencio dando expresiones para su temperatura, densidad y presión en función del número de Mach, M , y de la constante adiabática, γ (p.e., [Kundu, 1990](#)). En estas condiciones, la temperatura cinética del gas expandido es:

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2. \quad (9.8)$$

Considerando además que el gas es isentrópico ($p \propto \rho^\gamma$) tenemos que:

$$\frac{p_0}{p} = \left(\frac{T_0}{T} \right)^{\gamma/(\gamma-1)} = \left[1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \right]^{\gamma/(\gamma-1)} \quad (9.9)$$

y

$$\frac{n_0}{n} = \frac{\rho_0}{\rho} = \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/(\gamma-1)} = \left[1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \right]^{1/(\gamma-1)}, \quad (9.10)$$

donde T_0 , p_0 , ρ_0 y n_0 son los valores de estancamiento de la temperatura, la presión, la densidad de masa y la densidad numérica del fluido, respectivamente.

En la zona de silencio de una expansión de un gas monoatómico ($\gamma = 5/3$) es posible obtener valores para el número de Mach por encima de 100 (expansiones de He, [Rebrov, 1985](#)), lo que implica que $T \lesssim 0.1$ K, $p \lesssim 10^{-9}$ bar y $n \lesssim 5 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$. El número de Mach que se puede obtener expandiendo un gas molecular es menor que para un gas atómico. Aún así, con gases formados por moléculas diatómicas ($\gamma = 7/5$) se pueden alcanzar valores de $M > 10$ lo que implica que $T \lesssim 10$ K, $p \lesssim 5 \times 10^{-6}$ bar y $n \lesssim 5 \times 10^{21} \text{ m}^{-3}$ (ver los resultados de expansiones de N_2 en el Capítulo 11).

9.3. Rotura de equilibrio termodinámico en la zona de silencio

La rotura de equilibrio que sufre el gas a lo largo de la zona de silencio puede ser estudiada mediante la teoría de [Hamel & Willis \(1966\)](#). La densidad decae rápidamente en la zona de silencio a lo largo de las líneas de corriente (Ecs. 9.1 y 9.2), reduciéndose el número de colisiones por unidad de tiempo según aumenta la distancia a la boca de tobera. El tiempo de relajación puede variar en órdenes de magnitud entre un entorno cercano a la tobera y otro cercano al disco de Mach ([Rebrov, 1985](#)).

Durante gran parte la zona de silencio el gas se expande isentrópicamente, aumentando su número de Mach de forma progresiva hasta llegar a la onda de choque frontal. En las regiones de la zona de silencio más lejanas a la tobera la isentropía desaparece, tendiendo M a un valor constante. En este proceso aparece una diferenciación entre el comportamiento del gas a lo largo de las líneas de corriente y en las direcciones perpendiculares a ellas, manteniéndose la isentropía durante más tiempo en las perpendiculares.

Esta diferenciación en la evolución según la dirección procede de que las colisiones y la frecuencia con las que se producen éstas en las direcciones perpendiculares a las líneas de corriente son distintas que en la dirección paralela. Por lo tanto, el principio de equipartición de energía entre los grados de libertad traslacionales no es válido. El concepto de temperatura cinética pierde sentido y es necesario definir la *temperatura cinética paralela*, T_{\parallel} , y la *temperatura cinética perpendicular*, T_{\perp} , dando lugar a la llamada *distribución de poblaciones elíptica* ([Holway, 1965](#)). Se pueden cuantificar estas diferencias a través del parámetro *rotura de equilibrio*, $X = T_{\parallel} - T_{\perp}$. La distribución de poblaciones elíptica es una aproximación válida cuando $X \ll \bar{T}_t$ ([Willis et al., 1972](#)), donde $\bar{T}_t = (T_{\parallel} + 2T_{\perp})/3$ y que tomaremos en adelante como la temperatura traslacional del gas, T_t . A valores mayores de X , aparecen desviaciones significativas de la función de distribución del gas con respecto a la de Maxwell-Boltzmann ([Muntz, 1967](#); [Edwards & Cheng, 1967](#)).

En las expansiones de gases moleculares es posible redefinir el parámetro rotura de equilibrio rotación-traslación más adecuadamente de tal modo que $X = \beta B (T_t^{-1} - T_r^{-1})$, donde $\beta = hc/k_B = 1.4388 \text{ cm K}$ y B es la constante rotacional de la molécula considerada expresada en cm^{-1} ([Ramos et al., 2002](#)).

9.4. El efecto de la relajación rotacional en las expansiones supersónicas

El intercambio de energía entre los grados de libertad internos y externos a través de las colisiones tiene implicaciones importantes en la expansión. Por esta razón, una carac-

terización realista del gas en expansión sólo puede hacerse mediante la ecuación de Boltzmann generalizada. Randeniya & Smith (1990) hicieron este trabajo utilizando para ello una versión de la ecuación de Waldmann-Snider (Waldmann, 1957; Snider, 1960, Capítulo 8) adecuada para sistemas con niveles no degenerados: la llamada *ecuación de Wang Chang-Uhlenbeck* (Wang Chang et al., 1964). Si bien la anterior elección no permite el estudio de partículas con estructura interna, es adecuada para la determinación de las diferencias existentes entre el comportamiento de las expansiones de gases monoatómicos y el de los gases moleculares introducidas por los fenómenos de relajación.

Los resultados de este trabajo sugieren la existencia de variaciones significativas en el enfriamiento y el perfil de velocidad dependiendo de la composición del gas expandido. Los gases monoatómicos se enfrían muy rápidamente alcanzando velocidades similares a la terminal a distancias de unos pocos diámetros de tobera.

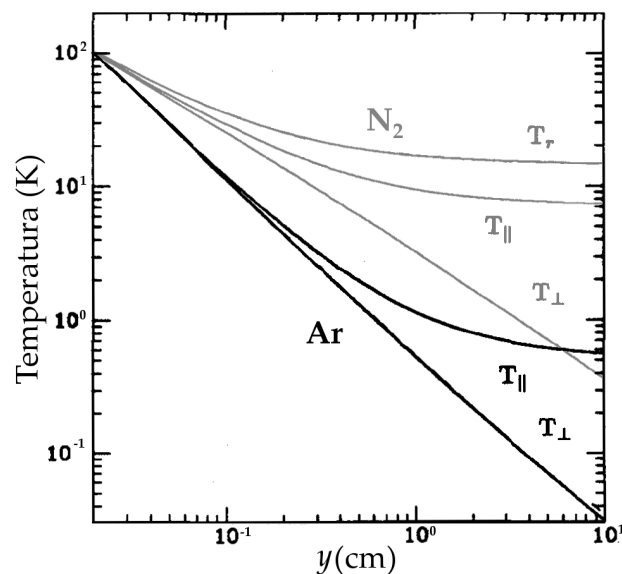


FIGURA 9.2.— Temperaturas en las expansiones de gases atómicos y moleculares. La Figura muestra la evolución de las temperaturas de dos gases en función de la distancia al origen de la expansión (en cm), considerando que ambas expansiones se producen en las mismas condiciones. Las curvas negras corresponden a las componentes paralela y perpendicular de la temperatura traslacional (T_{\parallel} y T_{\perp}) para una expansión de argón. Las curvas grises corresponden a las componentes paralela y perpendicular de la temperatura traslacional y a la temperatura rotacional (T_{\parallel} , T_{\perp} y T_r) en una expansión de N_2 . La existencia de la estructura interna del N_2 modifica ampliamente las componentes paralela y perpendicular de la temperatura traslacional con respecto a las de la expansión del argón. El decaimiento de la temperatura traslacional en el caso del argón es mucho más rápida que la del N_2 , aunque los comportamientos son similares (Figura tomada de Randeniya & Smith, 1990, modificada).

En el caso molecular, existe intercambio entre energía interna y energía cinética de las partículas del gas a temperatura ambiente. El decaimiento térmico del gas durante la expansión es significativamente más lento que en las expansiones de gases atómicos a consecuencia de la transferencia de energía rotacional al movimiento de las partículas (ver Figura 9.2). La transferencia de energía rotacional a los grados de libertad traslacionales genera un perfil de velocidades menos pronunciado que en el caso monoatómico, tardando más en aproximarse al valor asintótico (ver Figura 9.3). Además, la velocidad terminal depende del número de grados de libertad de las partículas, pudiendo llegar a ser muy

distinta de la esperada para gases monoatómicos.

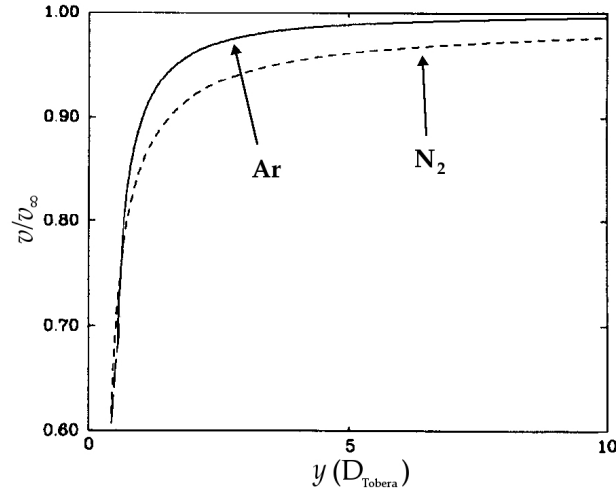


FIGURA 9.3.— Velocidades de expansión de gases atómicos y moleculares. En la Figura se ha representado la velocidad del gas de las expansiones de argón y N_2 de la Figura 9.2 normalizada al valor asintótico en función de la distancia al origen de la expansión, expresada en diámetros de tobera (D_{Tobera}). El argón alcanza velocidades muy próximas a la velocidad asintótica muy cerca de la tobera mientras que el N_2 no lo consigue sino hasta haberse alejado significativamente de la tobera (Figura tomada de [Randeniya & Smith, 1990](#), modificada).

La tendencia de la temperatura rotacional a tomar un valor constante es el resultado del decrecimiento de la frecuencia colisional a lo largo de la expansión. Como consecuencia, la cantidad de energía rotacional transferida a los grados de libertad traslacionales disminuye rompiéndose el equilibrio ($X > 0 \Rightarrow T_r > T_t$). Finalmente, la temperatura traslacional en la dirección paralela a las líneas de corriente se congela por falta de colisiones. La temperatura traslacional en la dirección perpendicular a las líneas de corriente mantiene su comportamiento decreciente, al ser un efecto puramente geométrico.

9.5. El papel de las transiciones radiativas en las expansiones de gas molecular

Hasta el momento hemos considerado los fenómenos colisionales en una expansión supersónica despreciando implícitamente los fenómenos de excitación/desexcitación radiativa que pudieran existir durante el *tiempo de vuelo*¹, τ_v , de las partículas que conforman el gas expandido.

Es posible estimar la importancia de las transiciones radiativas en los procesos de expansión calculando la proporción de partículas que se desexcitarían espontáneamente durante el tiempo de vuelo en una expansión determinada. Teniendo en cuenta que:

1. $\tau_v \sim z_M / \langle v_{exp} \rangle$, donde y_M es la posición del disco de Mach con respecto al origen de la expansión (Ec. 9.7) y $\langle v_{exp} \rangle$ la velocidad de expansión promedio del gas en la expansión, y
2. $f_\gamma = N_\gamma / N_0 \sim 1 - e^{-At}$ es la fracción de partículas que se desexcitan radiativa y espontáneamente desde un estado dado en un intervalo de tiempo $(0, t)$, consideran-

¹Llamaremos *tiempo de vuelo* de una partícula en una expansión supersónica al tiempo que tarda en recorrer la zona de silencio.

do que A es el coeficiente de desexcitación espontánea de Einstein para dicho nivel ($\tau = 1/A$, tiempo de vida media).

Suponiendo que $y_M \lesssim 1$ m y que $\langle v_{\text{exp}} \rangle \gtrsim 10^2$ m s $^{-1}$, se tiene que $\tau_v \sim y_M / \langle v_{\text{exp}} \rangle \lesssim 10^{-2}$ s. Si el gas expandido es atómico y esta expansión se realiza a temperatura ambiente, no hay emisión radiativa puesto que los niveles atómicos excitados no son accesibles ni mediante colisiones a temperatura ambiente ni mediante la radiación infrarroja existente inevitablemente en todo experimento realizado a temperatura ambiente. La expansión de gases atómicos a temperaturas lo suficientemente grandes como para excitar colisionalmente los átomos daría lugar a desexcitaciones radiativas posteriores, ya fueran espontáneas o inducidas. Los coeficientes de Einstein espontáneos para las transiciones radiativas son $\gtrsim 10^7$ s $^{-1}$ ($\tau \lesssim 10^{-7}$ s) para la mayor parte de las líneas atómicas permitidas ($> 90\%$; Verner et al., 1996), lo que permitiría la existencia de un gran número de desexcitaciones espontáneas durante el tiempo de vuelo de las partículas ($\tau \ll \tau_v$) y modificaría la expansión por pérdidas de energía térmica en forma de radiación.

Por otro lado, todas las especies moleculares se excitan rotacionalmente a temperatura ambiente, ya sea mediante colisiones o por absorción de fotones del campo de radiación ambiente. Las transiciones radiativas rotacionales únicamente afectan a las moléculas con momento dipolar permanente, mientras que el resto pueden absorber o emitir energía en forma de radiación sólo en el caso de que la temperatura sea lo suficientemente grande como para excitar los estados vibracionales menos energéticos. Este hecho hace de especies sin momento dipolar permanente como el H $_2$, el N $_2$ o el CO $_2$ candidatas perfectas para los estudios colisionales con fenómenos de relajación a temperaturas ambiente o menores.

El valor máximo del coeficiente de Einstein de los niveles rotacionales puros o rovibracionales accesibles a temperatura ambiente de las moléculas más comunes en la atmósfera terrestre es ~ 10 s $^{-1}$ ($E_{\text{nivel}} \lesssim 300$ cm $^{-1}$, $T_{\text{ambiente}} \simeq 300$ K $\simeq 200$ cm $^{-1}$; Base de Datos HITRAN). Esto supone que $\tau_v A \lesssim 0.1$ y $f_\gamma \lesssim 0.1$, lo que implica que el efecto de las transiciones radiativas espontáneas en las expansiones de gases moleculares ligeros con momento dipolar permanente (como el CO, el HCN o el H $_2$ O) puede llegar a ser significativo.

Considerando que el gas está inmerso en un campo de radiación dado por la función de Planck, la razón entre la probabilidad de emisión espontánea y la de emisión inducida es $A/B\rho = e^{h\nu/k_B T_{bb}} - 1$, donde T_{bb} es la temperatura de cuerpo negro, B es el coeficiente de Einstein de emisión estimulada y ρ es la densidad de energía. Las transiciones espontáneas dominan la emisión radiativa cuando $\nu \gtrsim k_B T_{bb}/h$. Para una expansión realizada a temperatura ambiente $T_{bb} \simeq T_{\text{ambiente}}$, lo que implica que las transiciones rotacionales y las rovibracionales con frecuencias pequeñas ($\nu \ll k_B T_{\text{ambiente}}/h \sim 5$ THz) se desexcitan radiativamente de forma inducida ($A/B\rho < 1$). Por lo tanto, las transiciones entre niveles cuyo nivel superior tenga una energía similar o menor a la energía térmica (en cada punto de la expansión) pueden ser fuente de variaciones en los perfiles de temperatura y velocidad del gas expandido con respecto al caso sin transiciones radiativas. Las moléculas pueden ganar o perder energía rotacional a través de las transiciones radiativas incrementando su energía cinética o transformando parte de esta energía en radiación.

Capítulo 10

Espectroscopía Raman, dispositivo experimental y metodología

En la Sección 9.1 hemos visto que la evolución de las propiedades físicas de las expansiones supersónicas en la zona de silencio depende fuertemente de los procesos colisionales y de relajación molecular. Por lo tanto, un muestreo adecuado de las condiciones físicas del gas a lo largo del eje de la expansión nos permitiría obtener información experimental relativa al comportamiento microscópico de las moléculas.

En este Capítulo expondremos el método de muestreo utilizado en los experimentos, la base teórica y las razones de su elección. A continuación, presentaremos el montaje experimental utilizado para obtener los perfiles de densidad y temperatura rotacional de varias expansiones de N_2 . Finalmente, exponemos la metodología óptima a seguir durante el proceso de toma de datos.

10.1. La espectroscopía Raman lineal como método experimental

El método experimental óptimo para realizar el muestreo anterior debería poder cumplir los siguientes objetivos:

- Proporcionar una *gran resolución espacial* para poder muestrear adecuadamente cualquier punto de la expansión y no mezclar información de regiones del gas próximas con propiedades físicas muy diferentes.
- Tener una *gran sensibilidad* siendo capaz de *tratar señales con intensidades muy distintas (gran rango dinámico)*. La densidad del gas expandido decae en su evolución hasta cuatro órdenes de magnitud. Sería necesario detectar señales cuyas intensidades cambiaran en varios órdenes de magnitud con el mismo instrumento.
- Presentar una *gran estabilidad temporal* que permitiera el estudio del sistema manteniendo las condiciones físicas durante sesiones experimentales largas (varias horas). En caso contrario las observaciones de los últimos puntos podrían no ser consistentes con las de los primeros.

La espectroscopía Raman lineal (ver Sección 10.1.1) posee estas características y otras deseables para la realización de un montaje experimental dedicado al estudio de expansiones moleculares supersónicas (Tejeda et al., 1996). Sus características son:

- *Universalidad*: Todas las moléculas pueden ser estudiadas puesto que es posible tomar espectros Raman de cualquier molécula aunque sea apolar.
- *Gran resolución espacial*: La construcción del experimento basado en este método de medida permite una resolución espacial de algunos micrómetros (ver Capítulo 10).

- *Linealidad*: Las densidades son estrictamente proporcionales a las intensidades Raman observadas, lo que permite la determinación experimental precisa de las primeras (ver Sección 10.1.1.1).
- *Gran rango espectral*: Se pueden estudiar transiciones entre 0 y 6000 cm⁻¹. Tal anchura permite estudiar una gran cantidad de transiciones rovibracionales incluso sin cambiar las condiciones del experimento.
- *Gran rango dinámico de intensidades*: Es posible medir intensidades que difieran en seis órdenes de magnitud con monocromadores de gran sensibilidad (Tejeda, 1997b).
- *No perturba el flujo del gas*: Es un método no intrusivo, evitándose la introducción de perturbaciones en el flujo.

10.1.1. Introducción al efecto Raman

La aplicación de un campo eléctrico externo sobre una distribución de carga no rígida produce tensiones internas y sus consiguientes deformaciones geométricas. Como consecuencia de estos cambios geométricos aparece un momento dipolar inducido en la distribución durante el tiempo que dure la acción del campo excitatriz. Si el campo eléctrico procede de un campo de radiación electromagnética que llamaremos *radiación excitatriz*, las deformaciones sufridas dependen del tiempo y la radiación es dispersada por la distribución de carga.

A la capacidad de los sistemas cargados en esta situación de cambiar de geometría se le llama *polarizabilidad*. Esta magnitud es una medida de cuan rígido o flexible es ese sistema y está representada por el *tensor de polarizabilidad*, α_{ij} . En general, la polarizabilidad de la mayor parte de las moléculas, átomos e iones es $\sim 10^{-40} - 10^{-39} \text{ CV}^{-1}\text{m}^2$, siendo necesaria una radiación excitatriz intensa para generar radiación dispersada observable. Al ser la polarizabilidad de las moléculas tan pequeña, la radiación dispersada por una molécula no afecta a otras cercanas. Por lo tanto, la intensidad de la radiación dispersada depende linealmente del número de moléculas dispersoras (ver Sección 10.1.1.1).

La acción de un campo eléctrico sobre una molécula perturba intensamente su función de onda electrónica generando un espectro de emisión compuesto por un gran número de transiciones. La duración del proceso de absorción y reemisión es $\sim 10^{-15} - 10^{-14} \text{ s}$ (Montero, 1983). En este proceso un fotón incide sobre una molécula situada en un nivel energético i , excitándola a un nivel r con una vida media $\sim 10^{-14} \text{ s}$. Si la molécula se desexcita espontáneamente al nivel i se emite un fotón de frecuencia igual al fotón excitatriz (*dispersión Rayleigh*), si se desexcita a un nivel f ($E_f > E_i$) la frecuencia del fotón emitido es menor que la del fotón excitatriz (*dispersión Raman-Stokes*), y si se desexcita al nivel f' ($E_{f'} < E_i$) la frecuencia del fotón emitido es mayor que la del excitatriz (*dispersión Raman-antiStokes*; ver Figura 10.1).

En el tratamiento cuántico del problema se utiliza la teoría de perturbaciones de segundo orden dependiente del tiempo (Placzek, 1934; Anderson, 1973; Long, 2002). El momento de la transición Raman, $R_{i \rightarrow f}$, entre los niveles i y f se puede escribir en función del campo eléctrico aplicado mediante el llamado *tensor de dispersión*, $S_{jk}^{i \rightarrow f}$:

$$S_{jk}^{i \rightarrow f} = \langle i | S_{jk} | f \rangle = \frac{1}{\hbar} \sum_{r \neq i, f} \left[\frac{\langle i | \mu_j | r \rangle \langle r | \mu_k | f \rangle}{\nu_{ri} - \nu_0} + \frac{\langle i | \mu_k | r \rangle \langle r | \mu_j | f \rangle}{\nu_{rf} + \nu_0} \right], \quad (10.1)$$

donde μ_j es la componente j -ésima del operador momento dipolar, ν_0 es la frecuencia de la radiación excitatriz y ν_{ri} y ν_{rf} son las frecuencias relativas a las transiciones $r \rightarrow i$ y $r \rightarrow f$ ($E_r > E_i, E_f$). El tensor $S_{jk}^{i \rightarrow f}$ es complejo y se puede descomponer en tres tensores distintos: uno isótropo (dispersión isótropa), otro simétrico con traza nula (dispersión cuadrupolar eléctrica) y un último antisimétrico (dispersión dipolar magnética; Anderson, 1973).

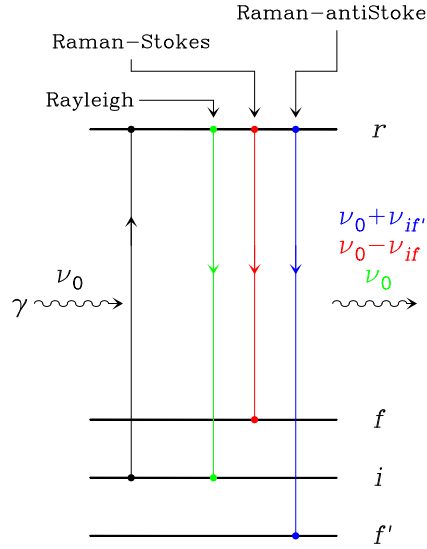


FIGURA 10.1.— Esquema de la dispersión Raman cuántica. Un fotón excita una molécula del nivel i al metaestable r que se desexcita espontáneamente. Esa desexcitación puede llevar a la molécula de nuevo al nivel i (dispersión Rayleigh; verde), al nivel f (dispersión Raman-Stokes; rojo), o al nivel i' (dispersión Raman-antiStokes; azul).

10.1.1.1. La aproximación de polarizabilidad

En virtud de la aproximación de Born-Oppenheimer y suponiendo que no existe interacción entre rotación y vibración, la función de onda molecular toma la forma $|\psi\rangle \simeq |\psi_e\rangle \otimes |\psi_v\rangle \otimes |\psi_r\rangle$, siendo $|\psi_e\rangle$ la función de onda electrónica, $|\psi_v\rangle$ la vibracional nuclear y $|\psi_r\rangle$ la rotacional total. Supongamos que:

- la frecuencia de la radiación excitatriz, ν_0 , es mucho menor que la frecuencia de la transición electrónica del estado fundamental g al estado excitado electrónico e , ν_{ge}^e ,
- la frecuencia de la transición electrónica $g \rightarrow e$ es mucho mayor que la de la transición vibracional del fundamental al excitado vibracional ν_{ge}^v , y que
- la frecuencia de la radiación excitatriz es mucho mayor que la frecuencia de la transición Raman del estado i al estado f , $|\nu_{if}|$.

En estas condiciones es posible demostrar que la acción del campo eléctrico excitatriz sobre la función de onda total afecta principalmente a la función de onda electrónica (Anderson, 1973). Las aproximaciones anteriores suponen que $\nu_{ri} - \nu_0 \simeq \nu_{rf} - \nu_0 \simeq \nu_{ge}^e$, pues los niveles intermedios, r , pertenecen al estado electrónico excitado e . Por lo tanto, se puede despreciar la contribución antisimétrica del tensor de dispersión y $S_{jk}^{i \rightarrow f} \simeq \alpha_{jk}^{i \rightarrow f}$.

La intensidad dispersada por una molécula es, en el Sistema Internacional de unidades (Montero, 1983):

$$I_{i \rightarrow f}^{x[jk]z} = N \left(\frac{\pi}{\varepsilon_0} \right)^2 (\nu_0 - \nu_{if})^4 \overline{|\langle i | \alpha_{jk} | f \rangle|^2} \underbrace{\frac{g_i}{Z} e^{-E_i/k_B T}}_{P_i} I_0, \quad (10.2)$$

donde $\overline{|\langle i | \alpha_{jk} | f \rangle|^2}$ es el momento de la transición promediado en las variables angulares, g_i es la degeneración del nivel i -ésimo y P_i es la población del nivel inicial. Haciendo un desarrollo de Taylor del operador polarizabilidad en las coordenadas normales de vibración y sustituyendo en la anterior expresión se obtienen las secciones eficaces de dispersión Rayleigh, Raman-Stokes y Raman-antiStokes.

Cabe señalar que, como la intensidad de la radiación dispersada depende de la población del nivel inicial, el espectro Raman-Stokes es más intenso que el Raman-antiStokes. Esto es debido a que una línea dada es generada en el espectro Raman-Stokes a partir de la excitación de las moléculas existentes en un nivel de menor energía que el espectro Raman-antiStokes (ver Figura 10.2).

Es posible calcular la intensidad dispersada por una molécula a través de un modo vibracional. Suponiendo el modo vibracional l ,

$$I_l^{x[jk]z} = N \left(\frac{\pi}{\varepsilon_0} \right)^2 (\nu_0 - \nu_l)^4 \overline{(\alpha_{jk})_l^2} g_l F_l I_0, \quad (10.3)$$

donde ν_l es la frecuencia de la transición vibracional, g_l es la degeneración del modo vibracional l , $\overline{(\alpha_{jk})_l^2}$ es el momento de la transición vibracional para el modo l promediado en las variables angulares, $F_l = (1 - e^{-\beta\nu_l/T_{\text{vib}}})^{-1}$ para la dispersión Raman-Stokes, $F_l = (e^{\beta\nu_l/T_{\text{vib}}} - 1)^{-1}$ para la dispersión Raman-antiStokes y T_{vib} es la temperatura vibracional (Montero, 1983; Long, 2002). Cuando $\beta\nu_l \ll T_{\text{vib}}$, $F_l \sim T_{\text{vib}}/\beta\nu_l$ para las dispersiones Raman-Stokes y Raman-antiStokes. Sin embargo, si $\beta\nu_l \gg T_{\text{vib}}$, $F_l \sim 1$ para la dispersión Raman-Stokes y $F_l \ll 1$ para la Raman-antiStokes. Por lo tanto, no se dispersa radiación Raman-antiStokes y la Raman-Stokes no depende de la temperatura vibracional.

En este caso, la relación de intensidades Raman-Stokes generadas por dos muestras de un mismo gas, a y b , con condiciones físicas distintas es:

$$\frac{I_{l,a}^{x[jk]z}}{I_{l,b}^{x[jk]z}} = \frac{N_a}{N_b} \frac{1 - e^{-\beta\nu_l/T_{\text{vib},b}}}{1 - e^{-\beta\nu_l/T_{\text{vib},a}}}. \quad (10.4)$$

Por lo tanto, como $T_{\text{vib},a}, T_{\text{vib},b} \ll \beta\nu_l$, $I_{l,a}^{x[jk]z}/I_{l,b}^{x[jk]z} \simeq N_a/N_b$.

10.1.2. Aplicación de la teoría al N_2

En esta Tesis aplicaremos la teoría expuesta a una expansión de N_2 , que es una especie simétrica con respecto al plano medio molecular y se compone de dos subespecies: el orto- N_2 (estados rotacionales con J par) y el para- N_2 (estados rotacionales con J impar).

Las condiciones físicas que se dan en las expansiones supersónicas N_2 a temperatura ambiente permiten hacer las siguientes aproximaciones:

1. la temperatura traslacional en cualquier punto de la zona de silencio no supera a la del gas en la boca de tobera ($\lesssim 300$ K). La energía del primer estado electrónico excitado es $\simeq 28000 \text{ cm}^{-1}$ ($\simeq 40000$ K; Barrow, 1962), lo que equivale a temperaturas inalcanzables en estas expansiones. Por lo tanto, todas las moléculas están en el estado electrónico fundamental.
2. La energía del primer estado vibracional excitado es $\simeq 2331 \text{ cm}^{-1}$ (Base de Datos HITRAN), necesitándose temperaturas mayores a 3000 K para poblar significativamente el primer estado vibracional excitado. Por lo tanto, el número de moléculas excitadas vibracionalmente es despreciable (ver Capítulo 10).

Todo esto supone que la función de partición molecular es aproximadamente igual a la rotacional. Además, como $T_{\text{vib}} \lesssim 300$ K por no haber transiciones radiativas significativas, $h\nu_{v=1 \rightarrow 0} \gg k_B T_{\text{vib}}$ siendo posible tomar el cociente $I_{v=1 \rightarrow 0}^{x[jk]z}/N \simeq \text{cte}$. Por otra parte, se pueden estudiar las poblaciones y la densidad a partir de radiación polarizada linealmente y dispersada en una única dirección.

La regla de selección para el espectro rotacional Raman de las moléculas diatómicas es $\Delta J = \pm 2$, siendo J el número cuántico rotacional. En estas condiciones se cumple que

(Long, 2002):

$$|\langle J|\alpha_{zx}|J+2\rangle|^2 = |\langle J|\alpha_{zy}|J+2\rangle|^2 = \frac{1}{15}b_{J+2,J}\gamma_0^2 \quad (10.5)$$

con

$$b_{J+2,J} = \frac{3}{2} \frac{(J+1)(J+2)}{(2J+1)(2J+3)}, \quad (10.6)$$

donde las constantes $b_{J+2,J}$ son los *factores de Placzek-Teller*. La expresión para la población rotacional de un nivel con un número cuántico rotacional J es:

$$P_J = \frac{g_J(2J+1)}{Z_r} e^{-\beta E_J/T_r}, \quad (10.7)$$

donde $\beta = 1.4388 \text{ cm K}$; E_J está expresada en cm^{-1} y g_J es la degeneración procedente de la estadística de espín. Para el caso del N_2 , como $I(^{14}\text{N}) = 1$ la relación entre los estados orto y para es de 2:1. La dependencia de E_J con J según la aproximación del rotor rígido es $E_J = BJ(J+1)$, donde $B(\text{N}_2) = 1.989730 \text{ cm}^{-1}$ (Bendtsen, 1974).

10.2. Montaje experimental

El montaje experimental utilizado (ver Figura 10.2) es el resultado de varias Tesis doctorales. Dicho montaje está dedicado a la obtención experimental de las propiedades físicas de un gas en expansión mediante el efecto Raman lineal (ver Capítulo 9 y Sección 10.1.1). El sistema está compuesto a grandes rasgos por una fuente de radiación excitatriz intensa, una cámara donde se generan las expansiones y un espectrómetro Raman. Estos instrumentos están acompañados por diferentes controles que proporcionan la flexibilidad suficiente como para obtener datos de gran calidad.

10.2.1. Descripción de los elementos del montaje

El montaje experimental está compuesto por los siguientes elementos¹:

1. *Cámara de expansiones**: La cámara de expansiones es un ortoedro hueco con dimensiones $55 \times 44 \times 59 \text{ cm}^3$ construida con paredes de aluminio de grosor 30 mm. Las paredes internas han sido ennegrecidas por electrolisis para minimizar reflejos. Cada una de las caras de la cámara tiene ventanas de acceso circulares de diferentes diámetros en tres posiciones distintas, siendo una de ellas más grande que las otras dos. Estas ventanas permiten un manejo cómodo de los instrumentos instalados en su interior, la entrada y salida de radiación, la instalación de medidores de presión y la introducción del gas a expandir desde el exterior. Todas las ventanas están tapadas con bridas que encajan con gran precisión en ellas, pudiéndose mantener presiones en la cámara $\lesssim 0.0001 \text{ mbar}$ si no se inyecta gas utilizando para ello juntas tóricas. Tres de las bridas están equipadas con vidrios óptico para permitir el acceso a la cámara de la radiación excitatriz (láser; dirección x), la salida de ésta de la radiación dispersada (brida más cercana al monocromador; dirección z) y para permitir el centrado de la tobera (brida más lejana al monocromador; dirección z ; ver Sección 10.3.2.2). Una de las bridas superiores (dirección y) permite el acoplamiento del tubo de evacuación de gases. La tobera está colocada en posición vertical (dirección y) en la intersección de los ejes x y z .

¹Los componentes marcados con el símbolo * han sido diseñados en el laboratorio de Fluidodinámica Molecular del Dpto. de Física Molecular del Instituto de la Estructura de la Materia (CSIC).

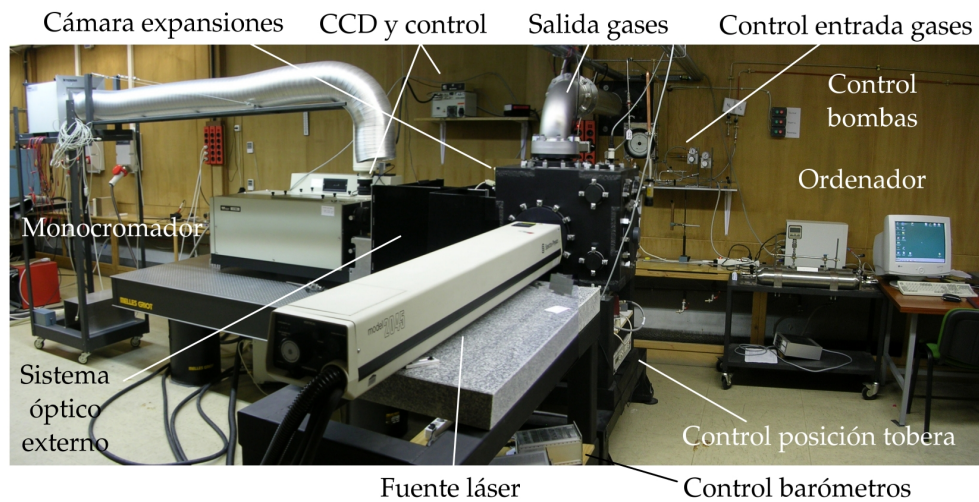
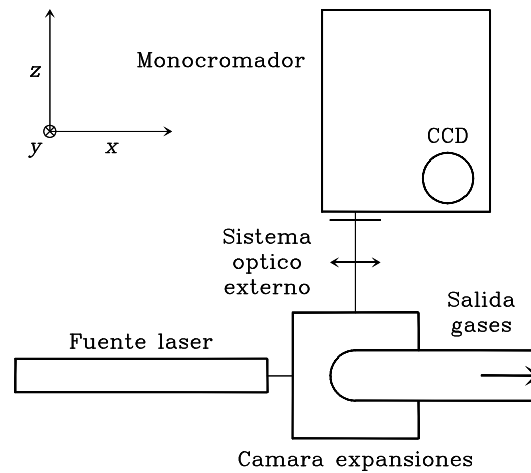
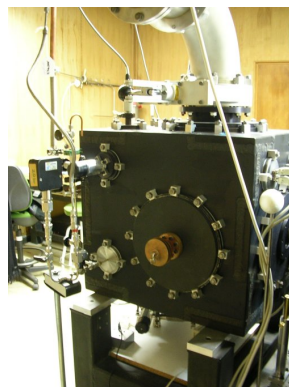
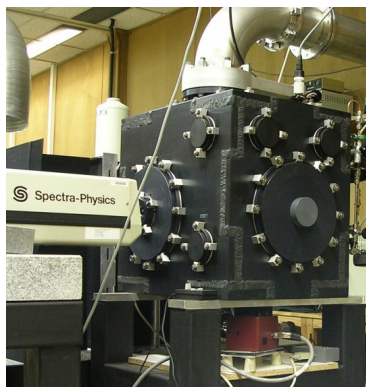
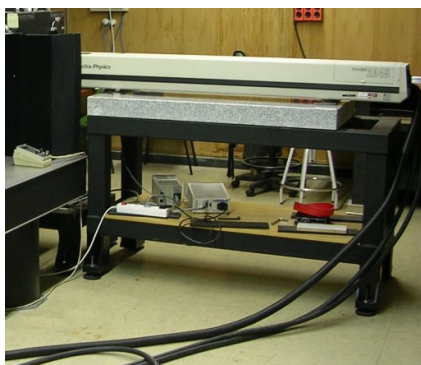


FIGURA 10.2.– Esquema del montaje experimental en planta (arriba) y visión panorámica (abajo). En la fotografía inferior se identifican todos los elementos del experimento, encontrándose fotografías de cada uno en el texto. El haz láser entra en la cámara de expansiones según la dirección x y polarizado linealmente en la dirección z o y , dependiendo de lo que se vaya a medir. El gas a observar se introduce en la cámara por medio de un sistema de alimentación regulado por dos manorreductores que permite controlar sensiblemente y de forma estable el caudal del gas. Posteriormente, se expande en la dirección y (en sentido negativo; hacia arriba). La radiación excitatriz interactúa con el gas expandido y es dispersada en todas direcciones (ver Sección 10.1.1). La parte de esta radiación dispersada en la dirección z y polarizada en las direcciones x e y es recogida y dirigida por el sistema óptico colector hacia el monocromador, registrándose su espectro con la CCD. El gas expandido es evacuado con la ayuda de un sistema de bombas cuya estabilidad permite mantener presiones residuales menores a 1 mbar durante periodos de tiempo largos (5 – 10 horas). El sistema de toma de datos está controlado íntegramente por ordenador a través del paquete REGISTRA* (Tejeda, 1997b).



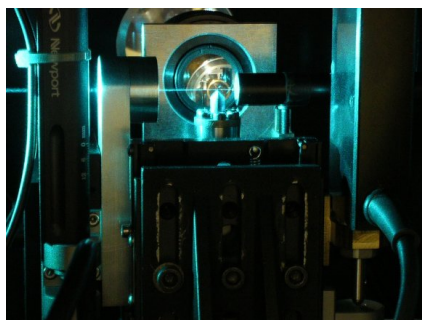
2. *Fuente de radiación excitatriz*: La fuente de radiación utilizada ha sido un láser de Ar^+ Spectra-Physics modelo 2045. Este láser amplifica diferentes líneas del Ar^+ entre 450 y 530 nm, de las cuales la más intensa es la de 514.5 nm correspondiente a la transición $(^3P)4p\ ^4D_{5/2}^0 - (^3P)4s\ ^2P_{3/2}$ (Weber, 2001). Esta transición se ha utilizado en multimodo con dominio del modo TEM_{00} para obtener un haz con la máxima intensidad y anchura mínima. Una vez alineada la óptica, la señal láser tiene una potencia de entre 1 y 8 W (trabajando con una intensidad de 20 A y 275 V, y 45 A y 510 V, respectivamente), siendo este rango el más estable. El tiempo de estabilización de este láser es de unos 30 minutos en condiciones óptimas de trabajo. La radiación generada está polarizada linealmente según la dirección y , pero puede ser rotada con una lámina de semionda.



3. *Control de entrada de gases**: El gas es introducido en el laboratorio con una presión de unos 8 bar, siendo posteriormente reducida con un manorreductor. Los manorreductores utilizados han sido los modelos Alphagaz HBS-240-8-3, $p_{\text{entrada}} \leq 240$ bar, $0.5 - 1 \lesssim p_{\text{salida}} \leq 8$ bar para presiones mayores de 1 bar y Alphagaz HBS-240-1-2, $p_{\text{entrada}} \leq 240$ bar, $0.1 \lesssim p_{\text{salida}} \leq 1$ bar² para presiones menores. El gas se lleva del manorreductor a la cámara de expansiones por medio de una línea de gases de acero inoxidable de 6 mm de diámetro y una pared de 1 mm de grosor. Esta tubería entra en la cámara a través de una brida, siendo el último tramo de la línea de gases un latiguillo flexible que permite el movimiento de la tobera. La presión de estancamiento del gas en la tobera o *presión en precámara* se ha medido utilizando un MKS Baratrón 690A con una precisión nominal del 0.08 % y que trabaja en el rango 0.01 – 1000 torr. Para presiones en precámara mayores de 1000 torr, se ha utilizado un barómetro Honeywell Sensotec con un rango de 3.5 bar sobre la presión atmosférica permitiendo determinar la presión buscada con una precisión del 0.1 %.

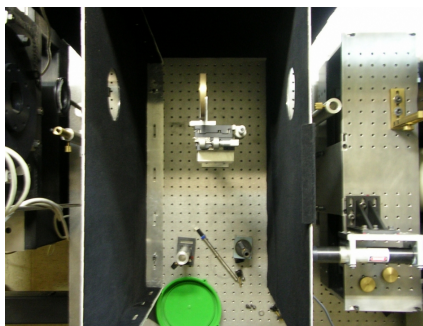
²Los valores mínimos para la presión de salida han sido estimados en nuestros experimentos.

4. *Tobera**: La tobera utilizada ha sido construida en latón. La boca de la tobera es un orificio con un diámetro promedio de $313\ \mu\text{m}$ y un canal de $1.8\ \text{mm}$ de longitud realizados con un taladro. La tobera está ennegrecida externamente con negro de humo para minimizar las reflexiones del halo del haz láser. Está colocada en el interior de la cámara de expansiones según la dirección y , orientada hacia arriba y debajo del tubo de evacuación de gases. Descansa sobre una combinación de plataformas móviles con microposicionadores que le proporcionan tres grados de libertad ortogonales, según las direcciones del sistema de referencia de la expansión (ver Figura 10.2). Es posible mover la tobera en esas tres direcciones gracias a tres microposicionadores de precisión controlados electrónicamente desde el exterior de la cámara con precisiones de $0.1\ \mu\text{m}$ (direcciones z e y) y $1\ \mu\text{m}$ (dirección x). El recorrido de los tornillos micrométricos codificados es de $25\ \text{mm}$ mientras que el del no codificado es de $12\ \text{mm}$.



Autor: G. Tejeda

5. *Sistema óptico interno**: El sistema óptico interno está compuesto por dos dispositivos ópticos. La *lente focalizadora* tiene un diámetro de $20\ \text{mm}$, una distancia focal de $35\ \text{mm}$ y un recubrimiento antirreflectante de banda ancha y gran eficiencia ($> 99.5\%$) para el rango del visible ($415 - 700\ \text{nm}$). Está colocada con eje óptico en la dirección x entre la ventana de acceso del haz láser y la tobera. Su función es la de focalizar el haz láser sobre el eje óptico del monocromador, punto que se ha tomado como origen del sistema de coordenadas de la cámara (ver Figura 10.2). Esta lente está montada en un soporte móvil controlado electrónicamente desde el exterior de la cámara de expansiones por tres microposicionadores de precisión. El segundo dispositivo es un objetivo fotográfico Leica, modelo Noctilux con una distancia focal de $50\ \text{mm}$ y apertura $f/1$. Se ha hecho coincidir su eje óptico con la dirección z . El objetivo está colocado entre la tobera y la ventana de la brida más cercana al monocromador o *ventana de colección*. Su colocación con respecto a la tobera permite recolectar la radiación dispersada en un ángulo sólido de $\approx 1\ \text{sr}$. El objetivo colima esta radiación y la dirige fuera de la cámara a través de la ventana de colección. Es posible mover el objetivo en la dirección z utilizando otro microposicionador controlado electrónicamente desde el exterior. El objetivo, junto con el sistema óptico externo forman el *sistema óptico de colección*, cuyo aumento lateral es ≈ 10 .
6. *Sistema óptico externo**: El sistema óptico externo forma parte del sistema óptico de colección y está compuesto por una lente y un diafragma iris. La lente es un *doblete acromático* con un diámetro de $80\ \text{mm}$ y una distancia focal de $490\ \text{mm}$. Está colocado entre la ventana de colección y el monocromador. Su eje óptico sigue la dirección z . Su función es enfocar la radiación recolectada por el objetivo sobre la rendija de entrada del monocromador. Es posible mover el doblete acromático en las direcciones z e y mediante dos tornillos micrométricos manuales con precisiones de $10\ \mu\text{m}$ y recorridos de $12\ \text{mm}$. Inmediatamente antes de la rendija del monocromador se ha situado un obturador automático que controla el tiempo que la CCD permanece expuesta a la radiación incidente.



7. *Monocromador*: El monocromador es un instrumento comercial Jobin Yvon modelo U1000 modificado con la introducción de unas redes de difracción holográficas de 2400 líneas/mm estando orientadas las líneas en la dirección x . La transmitancia del monocromador para la radiación polarizada linealmente según la dirección y es 10 veces mayor que para la polarizada en la dirección x . Este instrumento permite obtener espectros en el rango visible con resoluciones mayores a 50000. La posición de las redes de difracción está controlada por un motor de barrido que a su vez es controlado por ordenador (programa REGISTRA*; Tejeda, 1997b). Este motor permite obtener el espectro de la luz incidente en un rango de 6000 cm^{-1} . La combinación de este monocromador con una buena CCD permite el estudio de señales lumínicas con un rango dinámico de más de 6 órdenes de magnitud.

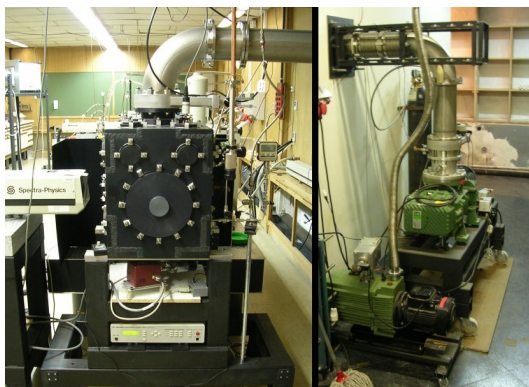


8. *CCD*: La CCD es una LN/CCD-2048/512 con un *chip* E2V CCD42-10 *Back Illuminated* recubierto para mejorar la sensibilidad en el UV y compuesto por pixeles cuadrados de $13.5\text{ }\mu\text{m}$ de lado distribuidos en 2048 filas y 512 columnas. El *chip* está colocado con las columnas en la dirección x y refrigerado con nitrógeno líquido ($T = 77.35\text{ K}$). El proceso de enfriado de la CCD es $\simeq 1$ hora, siendo la temperatura de trabajo típica $\simeq 230\text{ K}$. La eficiencia cuántica es $\simeq 65\%$ a $\simeq 500\text{ nm}$. Es posible controlar completamente la CCD por ordenador con el programa REGISTRA*.



9. *Evacuación de gases**: Los gases expandidos son evacuados de la cámara de expansiones a través de un tubo de acero inoxidable con un diámetro de 153 mm y paredes

de 2 mm. Este tubo está conectado a dos bombas de succión dispuestas en serie: una Roots Telstar RT-1400 y una rotatoria Telstar RS-70, con capacidades de bombeo de 1430 y 70 m³ h⁻¹, respectivamente. Debido a que la Roots no puede trabajar adecuadamente por encima de 100 – 150 mbar, se ha instalado una línea de gases adicional (*by-pass*) formada por un tubo de 18 mm de diámetro, que conecta la cámara de expansiones directamente con la bomba rotatoria. Este montaje permite mantener vacíos de 10⁻² mbar mientras se inyecta gas a 1 bar. Una válvula de guillotina de aluminio de accionamiento manual VAT serie 12 modelo 12044-PA06 colocada en la unión entre el tubo de evacuación y la cámara de expansiones posibilita el mantenimiento del vacío una vez apagadas las bombas.



10.2.2. Alineamiento de los sistemas ópticos

El alineamiento de los sistemas ópticos es un proceso clave en la realización del experimento. De su calidad depende que las señales recibidas por la CCD sean intensas o débiles, determinando la precisión de los datos derivados de la radiación recolectada.

El proceso de alineamiento se puede dividir en cuatro partes:

1. *Alineamiento de la cámara de expansiones con el eje óptico del monocromador.*- En este proceso el sistema óptico de colección no está presente. Se utiliza un láser de He-Ne ($\lambda = 632.8$ nm) para determinar el eje óptico del monocromador (eje z). Posteriormente se coloca la cámara de expansiones de tal modo que el haz láser pase por los centros de los orificios mayores de las paredes de la cámara más cercana y más lejana al monocromador (ver Figuras de la pág. 1 y Figura 10.2).
2. *Alineamiento del haz láser con la cámara de expansiones.*- Utilizando el láser de He-Ne como representación visual del eje z , se coloca el láser de tal modo que su haz pase por los centros de los orificios de las paredes de la cámara más cercana y más lejana a éste, y cruce con el haz del láser de He-Ne. No se utiliza lente focalizadora. Fijaremos el origen del sistema de coordenadas de la cámara, O_C , en el punto de cruce de los haces.
3. *Focalizado del haz láser en el eje óptico del monocromador.*- En este proceso se utiliza la lente focalizadora. La posición de la lente según los ejes y y z se fija haciendo que el cono de luz láser formado después del foco imagen de la lente focalizadora se distribuya simétricamente en torno al eje x . Posteriormente, la posición de la lente en la dirección x se determina colocando su foco en el punto O_C .
4. *Alineamiento de la óptica de colección.*- Se determinan las posiciones de los elementos ópticos de este sistema en las direcciones x e y tales que el haz del láser de He-Ne, que diverge por la acción de estos elementos, se distribuye de forma simétrica en torno al eje z . En primer lugar se coloca el objetivo seguido del doblete acromático. El

último paso consiste en maximizar una señal Raman optimizando las posiciones en las direcciones x e y y determinando las posiciones en la dirección z .

10.3. Procedimiento metodológico

10.3.1. Muestreo de la expansión

El objetivo del montaje experimental descrito anteriormente es el de crear un campo de radiación suficientemente intenso en una pequeña región de una expansión (en torno al punto O_C) como para que la dispersión Raman pueda ser observada con los instrumentos disponibles. El campo de radiación procede del haz láser focalizado, estando el tamaño de la zona afectada determinado por su anchura mínima. La forma del haz a lo largo del eje x es una hipérbola, registrándose el campo más intenso en el punto O_C . Por lo tanto, la región que puede dar lugar a dispersión Raman lineal observable o *región dispersora*, \mathcal{R} , es aproximadamente igual a un cilindro con un eje en la dirección x , cuyo baricentro en el origen del sistema de referencia, O_C , con diámetro $\simeq 14 \mu\text{m}$ y altura $\simeq 1 \text{ mm}$. La región de la expansión observada o *región de muestreo* puede ser igual o distinta a la región dispersora, dependiendo de la elección de los parámetros relativos a la rendija de entrada del monocromador y la superficie sensible de la CCD.

La altura de la rendija de entrada del monocromador puede variarse entre 1 y 10 mm y la anchura entre 30 y más de 300 μm . La anchura de rendija mínima utilizada ha sido de 50 μm pues los resultados no mejoran con anchuras menores. El valor máximo de esta magnitud ha sido fijado en 150 μm debido a que la anchura de la imagen de la rendija de entrada en la expansión ($\simeq 15 \mu\text{m}$) es mayor que la región \mathcal{R} . Una apertura excesiva de la rendija de entrada podría permitir la entrada en el monocromador de reflejos o dispersiones secundarias de regiones adyacentes de la expansión, contaminando los datos. La altura se ha variado entre 1 y 5 mm para evitar contaminaciones, aunque en algún se han llegado a utilizar 10 mm. Por lo tanto, la región de muestreo máxima considerada ha sido de $14 \mu\text{m} \times 1 \text{ mm}$.

La altura mínima para la rendija de entrada (1 mm) es excesivamente grande para medir cerca de la tobera. Este hecho se puede corregir mediante modificaciones en la región sensible de la CCD. La radiación que atraviesa la rendija de entrada del monocromador es separada en sus diferentes frecuencias por las redes de difracción en la dirección y manteniéndola intacta en la dirección x . En estas condiciones se definen el *agrupamiento vertical* y el *agrupamiento horizontal* como la cantidad de píxeles físicos (o píxeles simplemente) que forman un *pixel efectivo*³ en las direcciones *vertical* y *horizontal* de la CCD, respectivamente (direcciones x e y en el sistema de coordenadas de la cámara). Por lo tanto, una reducción de la región sensible de la CCD supone el tomar en cuenta únicamente los datos procedentes de una parte de la imagen de la rendija de entrada en la CCD. De este modo, la altura mínima de la región de muestreo es igual a la de la imagen de un pixel físico de la CCD en la expansión. El *chip* de la CCD está compuesto por píxeles cuadrados de lado $\simeq 13.5 \mu\text{m}$, cuya imagen en la expansión es $\simeq 1.4 \mu\text{m}$, es decir, $\simeq 70$ veces menor que la altura de la imagen de la rendija de entrada mínima posible.

Los tamaños elegidos de la rendija de entrada y de la región sensible de la CCD dependen de la posición de la zona de la expansión a muestrear. A causa de los fuertes gradientes cerca de la boca de tobera, es necesario elegir un rendija de entrada y una región sensible de la CCD pequeñas. Aún así, la gran densidad del gas en esta zona permite obtener espectros con relaciones señal-ruido mayores de 5000. Conforme la distancia entre la zona de la expansión a muestrear y la boca de tobera aumenta, la densidad decrece siendo necesario

³Definimos un *pixel efectivo* como la superficie rectangular de la región sensible de la CCD que está formada por uno o varios píxeles físicos y que consideramos como unidad de detección. El número de fotones detectados por un pixel efectivo es la suma de los fotones detectados por los píxeles físicos de los que está compuesto. Siguiendo esta definición el tamaño mínimo de un pixel efectivo es un pixel físico y el tamaño máximo es el chip entero.

abrir la rendija progresivamente e incrementar las dimensiones de la superficie sensible de la CCD para obtener buenos espectros.

Estas operaciones no permiten controlar la profundidad de la región de muestreo (tamaño según el eje z). Esto podría ser una limitación en el muestreo de expansiones generadas por toberas cuyas bocas tuvieran diámetros $\lesssim 100 \mu\text{m}$. A distancias de la boca de tobera menores a $150 - 300 \mu\text{m}$ una región con una profundidad de $\simeq 14 \mu\text{m}$ puede contener moléculas pertenecientes a regiones con condiciones físicas distintas. No obstante, el diámetro de la tobera utilizada en nuestros experimentos ($313 \mu\text{m}$) es lo suficientemente grande como para que no existan grandes desviaciones de la situación real a partir de $50 - 100 \mu\text{m}$.

La elección del tamaño de la región de muestreo requiere de un conocimiento global de la estructura de la expansión. Es posible considerar que la expansión en la zona paraxial es prácticamente esférica, siguiendo las líneas de corriente direcciones radiales desde el centro de la boca de tobera. En consecuencia, los volúmenes de gas a la misma distancia de este punto forman arcos con las mismas condiciones físicas cuya longitud crece linealmente con la distancia a la boca de tobera. Por lo tanto, es posible estimar la longitud máxima en la dirección x de las regiones de muestreo a cualquier distancia de la boca de tobera para que contengan gas con condiciones físicas aproximadamente constantes utilizando la longitud de dichos arcos. Considerando un triángulo isósceles con su vértice distinto en el centro de la boca de tobera, altura igual a la posición del centro del disco de Mach (y_M) y base igual a la máxima anchura de la zona de silencio en la dirección x ($\simeq 0.75y_M$, [Tejeda et al. 1996](#)), la longitud de los arcos viene determinada aproximadamente por la distancia entre los catetos mayores de dicho triángulo según la dirección x (ver Figura 10.3). Entonces, la región de muestreo en cada posición y es cualquiera que esté contenida en el triángulo anterior y que proporcione una señal suficientemente intensa. El triángulo anterior es útil principalmente cerca de la tobera pues lejos de ella la altura de la región de muestreo viene determinada por la altura de la imagen de la rendija de entrada en la expansión.

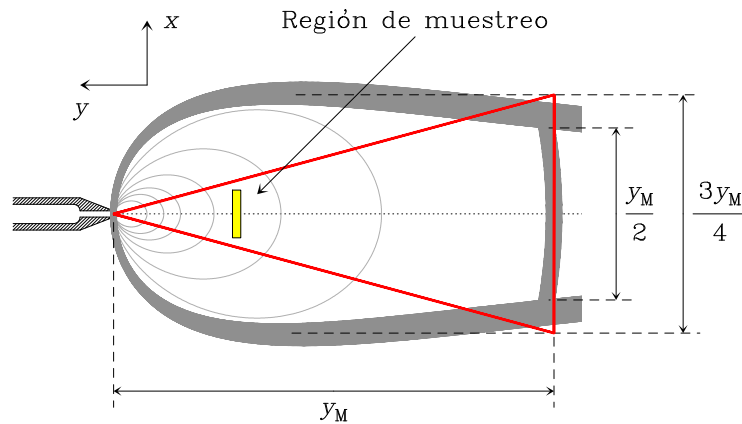


FIGURA 10.3.— Estimación de la región de muestreo. Es posible aproximar la geometría de la zona de silencio con características físicas similares mediante el triángulo rojo representado en la Figura. Este triángulo permite estimar la altura máxima que deben tener las regiones de muestreo (en amarillo) en cada punto de la expansión para que en ellas las condiciones físicas sean aproximadamente constantes.

La mayor cantidad de puntos muestreados deben ser cercanos a la tobera por la intensidad de los gradientes existentes en esa zona. Sin embargo, la zona más alejada de ésta también debe estar bien muestreada, pues un muestreo deficiente puede producir errores grandes en la determinación de las derivadas de las poblaciones, necesarias durante la reducción de los datos experimentales (ver Figura 10.4 y Sección 10.3.3).

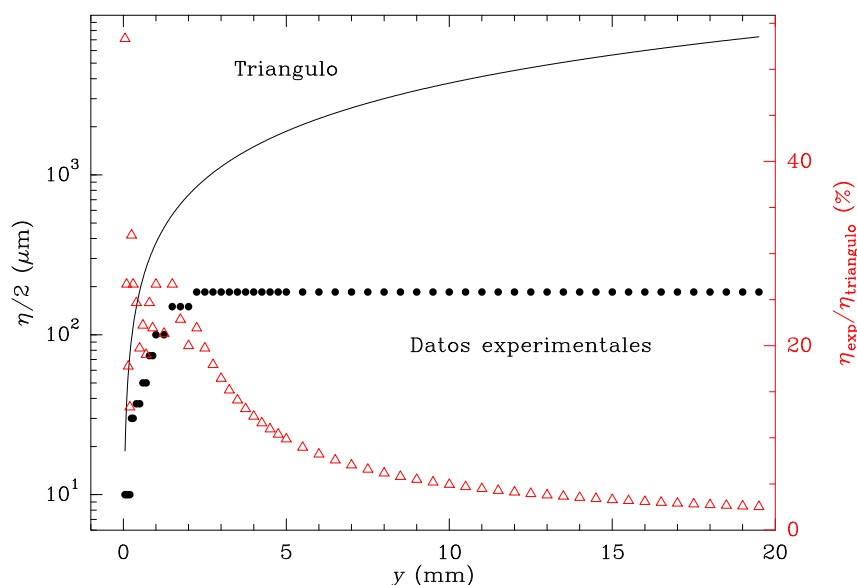


FIGURA 10.4.— Muestreo de la expansión y semialtura de la región de muestreo. La Figura muestra la semialtura de la región de muestreo, $\eta/2$, de una expansión de N_2 con una presión en precámara de $\simeq 2000$ mbar en función de la distancia de las regiones de muestreo a la boca de tobera (puntos negros). Además, se incluye en forma de una línea continua uno de los lados del triángulo utilizado para estimar la altura máxima de las regiones de muestreo (ver texto). Los triángulos rojos representan el cociente de la altura de las regiones de muestreo experimentales (η_{exp}) y la altura máxima estimada con la ayuda del triángulo ($\eta_{\text{triangulo}}$). En todos los puntos excepto el más cercano a la tobera, este cociente es menor del 50 %, reduciéndose gradualmente conforme alejamos la tobera del origen del sistema de referencia de la cámara.

10.3.2. Toma de datos

El objetivo de estos experimentos es el de obtener los perfiles de temperatura rotacional y densidad a lo largo de los ejes de varias expansiones de N_2 . La temperatura rotacional se puede determinar a partir del espectro rotacional del estado vibracional fundamental. La densidad, utilizando el espectro Raman de la rama Q de la transición vibracional fundamental (Montero, 1995), situado a $\simeq 2331 \text{ cm}^{-1}$ del origen del espectro rotacional. Si se quisieran registrar ambos tipos de espectros en una sola sesión experimental, sería necesario reenfoque el sistema óptico de colección al cambiar de un rango de frecuencias a otro para cada región de muestreo. Esta operación podría dar lugar a la introducción de errores experimentales en los datos procedentes de los dispositivos y del experimentador, siendo preferible realizar una sesión experimental para cada tipo de espectro.

10.3.2.1. Parámetros importantes en el registro de los espectros

Una vez elegidas la posición en la expansión y las dimensiones de la región de muestreo (ver Sección 10.3.1), se fijan la región sensible de la CCD, el número de espectros a tomar, el tiempo de integración para cada espectro, el número de fotografías⁴ por espectro y la resolución espectral, es decir, el tamaño horizontal de los píxeles efectivos de la CCD (Tejeda et al., 1997a).

- *Región sensible de la CCD:* Durante los experimentos se ha tomado una región de $20 - 400 \times 2000$ píxeles para evitar efectos de borde.

⁴Definimos *fotografía* como el rango del espectro que se puede tomar al mismo tiempo (*multiplex*) sin necesidad de modificar la configuración monocromador-CCD.

- *Tamaño del pixel efectivo*: Hemos considerado el agrupamiento vertical como la altura de la región sensible (2048 pixeles) y un agrupamiento horizontal de entre 1 y 5 pixeles. Esta elección produce espectros con una buena relación señal-ruido (ver Capítulo 11 y Apéndice D) y con las líneas rotacionales resueltas.
- *Número de fotografías en un espectro*: La anchura en frecuencias de una fotografía es de $\simeq 50 - 75 \text{ cm}^{-1}$ dependiendo de la frecuencia central del rango a observar. En el caso del espectro de vibración, basta con utilizar una fotografía puesto que la anchura de la rama Q de la transición $v = 1 \leftarrow 0$ es $\simeq 10 \text{ cm}^{-1}$ a $\simeq 250 \text{ K}$. A estas temperaturas, en los espectros rotacionales de regiones de muestreo cercanas a la tobera las líneas con $J > 15$ no son despreciables siendo necesarias 2 fotografías.
- *Número de espectros*: Dependiendo de la región de la expansión a estudiar y las condiciones de registro, el número de espectros de buena calidad tomados en un mismo punto de la expansión varía entre 3 y 8. Sin embargo, en alguna ocasión ha sido necesario tomar 12, por estar varios de ellos contaminados por rayos cósmicos (*spikes*).
- *Tiempo de integración por espectro*: En las regiones cercanas a la tobera los tiempos de integración elegidos han sido de 10 s, aumentándose hasta 60 s en las regiones más lejanas de la tobera.

10.3.2.2. Optimizado del dispositivo experimental

En la Sección 10.2.2 hemos expuesto los procedimientos esenciales para la puesta a punto global del montaje experimental. No obstante, hay ciertos elementos del montaje que conviene recalibrar antes de cualquier experimento. Los resultados son muy sensibles al estado de estos dispositivos y el inevitable cambio de las condiciones experimentales entre dos sesiones consecutivas condiciona en gran medida la calidad de los datos.

Optimizado de la señal Raman

El efecto de la radiación Rayleigh en los espectros rotacionales Raman observado es el de contaminar con sus alas las líneas con valores pequeños de J , perturbando la línea de base, los perfiles de línea y reduciendo la relación señal-ruido. Por lo tanto, minimizar o eliminar de la señal registrada las contribuciones de la radiación Rayleigh y posibles reflejos mejora la calidad de los espectros.

La haz láser utilizado está polarizado en la dirección y manteniéndose la polarización de la radiación dispersada Rayleigh en esa misma dirección. La calidad de la señal registrada se puede mejorar evitando que la radiación Rayleigh sea dispersada en la dirección z . La introducción de una lámina de semionda entre el láser y la ventana de acceso del haz a la cámara de expansiones rota la polarización del haz láser a la dirección z dispersándose la radiación Rayleigh en el plano xy . En esta situación, la radiación que llega al monocromador es generada únicamente por la componente anisótropa del tensor de polarizabilidad.

Centrado de la tobera

La determinación del origen del sistema de referencia de la cámara, O_C , es especialmente importante para la observación de la expansión cerca de la tobera. Al no ser posible conocer la posición exacta de la superficie sónica de la expansión (Sección 9.1.3), es una buena aproximación considerar que coincide con el plano que contiene a la boca de la tobera. En estas condiciones, definimos el *origen de la expansión* como la intersección entre la superficie sónica y el eje de la expansión. El objetivo del proceso de centrado de la tobera es el de hacer coincidir de forma iterativa el origen de la expansión con el punto de focalización del haz láser, O_C .

Sean (x, y, z) las coordenadas iniciales del origen de la expansión en el sistema de coordenadas de la cámara. El proceso de centrado está basado en la maximización de la rama Q de la transición $v = 1 \leftarrow 0$, proporcional a la densidad del gas (Sección 10.1.1.1). Durante los experimentos la tobera se mueve únicamente en la dirección y , lo que obliga a centrarla en esta dirección antes de cada experimento y hace innecesario este proceso en las direcciones x y z .

El proceso de centrado de la tobera en la dirección y puede resumirse en los siguientes pasos (ver Figura 10.5):

1. Con el láser apagado, se coloca una fuente de luz blanca extensa en el eje z dejando la cámara de expansiones entre ella y el monocromador.
2. Se fijan las dimensiones de la rendija de entrada del monocromador a $50 \mu\text{m} \times 1 \text{ mm}$.
3. Se bloquea con la tobera el paso de luz hasta la rendija de entrada. Esto es posible porque boca de tobera queda por encima del punto O_C y su imagen en el plano que contiene a la rendija de entrada tiene una anchura de $\simeq 3 \text{ mm}$.
4. Se desplaza la tobera hacia abajo hasta que comience a llegar la luz a la CCD.

La dependencia de la intensidad de la señal observada con la posición de la tobera en el eje y es de tipo aproximadamente sigmoideal, con un valor mínimo (asintótico) I_{\min} y un valor máximo (asintótico) I_{\max} . Por lo tanto, cuando el origen de la expansión coincide con el punto O_C , la intensidad de la señal es $(I_{\max} + I_{\min})/2$. En este proceso es importante no cambiar las condiciones ambientales de iluminación para asegurar que el punto de inflexión de la curva es precisamente el promedio de los valores máximo y mínimo.

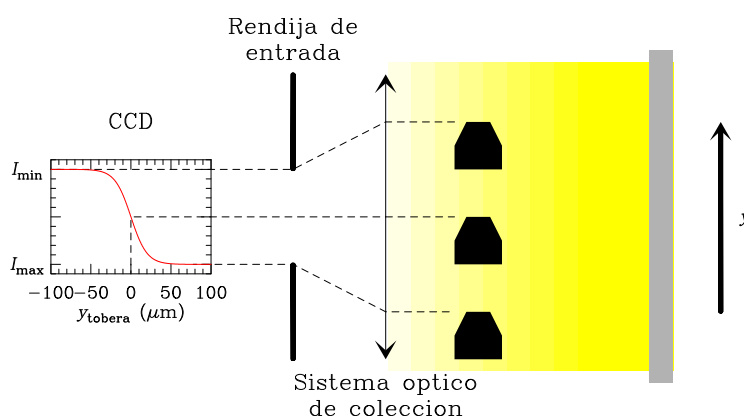


FIGURA 10.5.— Proceso de centrado de la tobera en el eje y . Se hace incidir luz blanca sobre la cámara de expansiones en la dirección z registrando la señal detectada, I , para diferentes posiciones de la tobera. El valor máximo de la intensidad, I_{\max} , se alcanza cuando la tobera no bloquea la luz incidente y el valor mínimo, I_{\min} , cuando la bloquea totalmente. Si la imagen de la boca de la tobera en el plano de la rendija de entrada está dentro de la rendija, $I_{\min} < I < I_{\max}$. Cuando la intensidad registrada es $(I_{\max} + I_{\min})/2$ el origen del sistema de coordenadas, O_C , está en el plano que contiene a la boca de tobera.

10.3.2.3. Descripción de una sesión experimental genérica

A continuación se indican los pasos seguidos en tres sesiones genéricas de toma de datos dirigidas a la obtención de temperaturas rotacionales (espectro rotacional), densidades relativas y densidades absolutas (rama Q vibracional). Nótese que las frecuencias que se pueden encontrar a continuación son frecuencias *relativas a la de la radiación excitatriz*

($514.5 \text{ nm} = 19436.35 \text{ cm}^{-1}$). Supondremos que el montaje está alineado, los medidores de presión y el motor de barrido encendidos, la CCD y el láser están en condiciones de trabajo y la cámara en vacío.

Temperaturas rotacionales

1. Se calibran los aparatos de medida.
2. Se coloca el motor de barrido a 60 cm^{-1} y se enfoca la óptica. Es recomendable hacer este proceso en cada sesión para corregir posibles desviaciones, pues las intensidades de las señales registradas son muy sensibles a variaciones en las posiciones del objetivo y del doblete acromático. El enfoque de estos dispositivos se realiza maximizando una señal generada con gas en estático.
3. Se sitúa el motor de barrido en 0 cm^{-1} y se minimiza la señal Rayleigh con la lámina de semionda.
4. Se coloca el motor de barrido de nuevo en 60 cm^{-1} . Se centra la tobera en la dirección y (ver Sección 10.3.2.2).
5. Se conecta el sistema de vacío y se genera la expansión a la presión deseada, esperando hasta la estabilización del flujo.
6. Se registran las señales dispersadas Raman en diferentes posiciones del eje de la expansión seleccionando para cada posición el tamaño de la rendija de entrada del monocromador, los agrupamientos horizontal y vertical de la CCD, el tiempo de integración y el número de espectros registrados en cada región de muestreo. Al ser los microposicionadores dispositivos mecánicos, podría aparecer histéresis en sus componentes a causa de una inversión en el sentido del movimiento de la tobera, haciendo irreversibles las posiciones de las regiones de muestreo. Por lo tanto, el movimiento de la tobera al cambiar de región de muestreo debe realizarse *siempre* alejándola del origen del sistema de referencia de la cámara y en sentido positivo a lo largo del eje y .

Densidades relativas

La determinación de las densidades absolutas en cada punto requiere registrar las ramas Q de la transición vibracional $v = 1 \leftarrow 0$ del gas en expansión, de un gas de control en estático y comparar ambas medidas (ver Sección 10.3.3). Esto supone una gran cantidad de operaciones durante el experimento que pueden dar lugar a errores. Por lo tanto, es preferible dividir el estudio de las densidades en dos partes desacopladas: la medida de las densidades relativas y la medida de las densidades absolutas.

El procedimiento de medida de las densidades relativas es prácticamente el mismo que para las temperaturas rotacionales. No obstante, hay ciertos cambios que se exponen a continuación:

- La frecuencia central de la rama Q de la transición $v = 1 \leftarrow 0$ es $\simeq 2331 \text{ cm}^{-1}$. El enfocado de la óptica debe realizarse a esas frecuencias para obtener una señal óptima.
- El efecto sobre el espectro de la dispersión Rayleigh es prácticamente nulo debido a la distancia en frecuencias entre la línea Rayleigh y la rama Q rovibracional del N_2 . Además, la radiación dispersada correspondiente a la rama Q está polarizada en la misma dirección que la radiación dispersada Rayleigh. Por lo tanto, se debe maximizar la señal de la rama Q con la lámina de semionda.

- Nótese que mediante este procedimiento *no es posible obtener valores de la densidad absoluta fiables* puesto que no es posible conocer la relación exacta entre la intensidad de la rama Q y la densidad del gas que genera la señal. Sin embargo, se obtiene la relación existente entre las densidades del gas en puntos adyacentes a partir de las relaciones entre las intensidades de sus ramas Q. Por ello, en los puntos de cambio de las condiciones de observación es absolutamente necesario registrar las señales antes y después del cambio.

Densidades absolutas

Para determinar la función densidad completa únicamente falta escalar el perfil obtenido en el experimento anterior. Este escalado se hace registrando los espectros en varios puntos de la expansión ($\simeq 5 - 10$) y el mismo número de espectros en estático con presiones conocidas y *en las mismas condiciones de observación* (iluminación, enfoque, alineamiento, etc.).

El procedimiento de medida es el mismo que el empleado para las densidades relativas hasta el momento de comenzar con las medidas. Después se siguen estas directrices:

1. Se eligen varias posiciones a lo largo de la expansión que se hayan considerado durante la toma de datos de las densidades relativas, tratando de utilizar las mismas condiciones experimentales.
2. Se sitúa la tobera en el punto a observar y se toma una serie de espectros en expansión con una presión en precámara lo más próxima posible a la utilizada en el experimento de las densidades relativas.
3. Se corta la expansión y se llena la cámara con gas a una presión tal que los espectros registrados tengan una intensidad del mismo orden de magnitud que la obtenida en la expansión (diferenciándose en un factor $\lesssim 2 - 3$; ver Sección 10.3.3).
4. Se repiten estos dos últimos pasos varias veces en el mismo punto para hacer un promedio y calcular la desviación estadística.
5. Se cambia de punto y se repite el proceso desde el punto 2.

Es imposible generar dos expansiones con una presión de estancamiento. Por lo tanto, no se deben utilizar los espectros tomados en el experimento de las densidades relativas para el cálculo de las densidades absolutas, pudiendo introducir errores de hacerlo así. No obstante, suponer que el perfil de densidades apenas varía en expansiones obtenidas con presiones en precámara similares es una aproximación razonable (ver Sección 9.1.1).

10.3.3. Reducción de los datos experimentales

En esta Sección se expone el proceso de reducción de los datos experimentales obtenidos según el procedimiento de la Sección anterior. Durante toda la reducción de datos las incertidumbres de las magnitudes obtenidas serán de dos desviaciones estándar (2σ).

10.3.3.1. Normalización de las poblaciones rotacionales

En la reducción de datos se tienen en cuenta todas las líneas rotacionales por encima del nivel del ruido, considerando las que están por debajo como despreciables. Utilizando las Ecs. 10.2, 10.5 y 10.6, y la condición $\nu_0 \gg \nu_{if}$, donde ν_0 es la frecuencia de la radiación excitatriz, se obtiene que (p.e., [Ramos, 2001](#)):

$$P_J \propto I_{J \rightarrow J+2}^{x[zy]z} \frac{(2J+1)(2J+3)}{(J+1)(J+2)}, \quad (10.8)$$

donde J es el número cuántico rotacional del nivel considerado, P_J su población e $I_{J \rightarrow J+2}^{x[zy]z}$ la intensidad de la línea $J + 2 \rightarrow J$. La constante de proporcionalidad se puede hallar aplicando la condición de normalización para la distribución de poblaciones: $\sum_{i=\text{par}} P_i = 2/3$ (o- N_2) y $\sum_{i=\text{impar}} P_i = 1/3$ (p- N_2).

10.3.3.2. Determinación de las temperaturas rotacionales, sus incertidumbres y su ajuste

La determinación de la temperatura rotacional para cada región de muestreo se realiza con las poblaciones de los niveles. Representando las cantidades $\ln \{P_J / [g_J (2J + 1)]\}$ frente a $J(J + 1)$ (*plot de Boltzmann*; ver Figura 10.6), es posible hacer un ajuste lineal de la nube de puntos cuya pendiente es la cantidad $-\beta B/T_r$, suponiendo el efecto de la constante de distorsión centrífuga como despreciable (aproximación del rotor rígido)⁵. Si el gas de

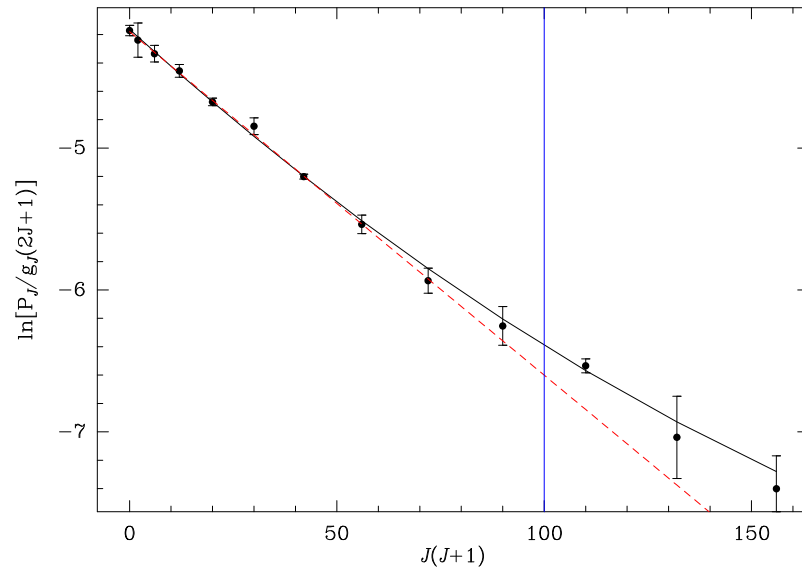


FIGURA 10.6.— Ejemplo de *plot de Boltzmann* de una expansión. La Figura muestra las poblaciones experimentales asociadas a una región de muestreo a $900 \mu\text{m}$ de la boca de tobera en una expansión a 500 mbar (puntos negros). La línea continua negra es un ajuste parabólico pesado ($1/\text{error}^2$) de la nube completa de puntos experimentales. La línea discontinua roja es el ajuste lineal pesado de los puntos experimentales a la izquierda de la línea vertical azul. La separación entre ambos ajustes para valores grandes de J indica la desviación de la distribución de Boltzmann. La temperatura rotacional derivada del conjunto de puntos a la izquierda de la línea azul es $T_r = 118 \pm 3 \text{ K}$.

las regiones de muestreo está en equilibrio termodinámico local la nube de puntos representa una recta. Si está fuera del equilibrio se producen desviaciones del comportamiento lineal para los valores de J mayores. Este hecho implica que no es posible utilizar la distribución de Boltzmann para describir las poblaciones de los niveles de energías grandes en esas regiones de muestreo (ver Figura 10.6; Capítulo 9). Pero es posible estimar la temperatura rotacional utilizando los niveles con valores pequeños de J mediante un ajuste lineal por mínimos cuadrados de estos datos pesado con las incertidumbres experimenta-

⁵Para el N_2 $B = 1.989730 \text{ cm}^{-1}$ y $D = 5.76 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ (Bendtsen, 1974). El valor del sumando $B J(J + 1) \simeq 541.21 \text{ cm}^{-1}$ para el nivel máximo en los experimentos ($J = 16$) mientras que el sumando $D J^2(J + 1)^2 \simeq 0.43$. Por lo tanto, el segundo es $\sim 10^{-3}$ veces el primero, siendo posible despreciar la contribución de la distorsión centrífuga en nuestros experimentos.

les ($w_i = 1/\sigma_i^2$). La función a minimizar es:

$$\chi^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [v_i - f(u_i; \alpha)]^2 w_i, \quad (10.9)$$

donde los pares (\mathbf{u}, \mathbf{v}) son las coordenadas de los puntos a ajustar, α es el vector de parámetros del ajuste, w_i es el peso asociado al punto experimental i -ésimo y $f(\mathbf{u}, \alpha)$ es una función lineal en los parámetros α .

Una vez obtenidas las temperaturas rotacionales en cada una de las regiones de muestreo observados de la expansión, se procede a ajustarlos mediante la función tipo:

$$T_r(\xi) = T^* - (T^* - T_\infty) e^{-C_1/(\xi+C_2)}, \quad \xi \geq 300 \mu\text{m}. \quad (10.10)$$

Se define $\xi = y_0 - y$, donde y_0 es la posición de la boca de la tobera en el sistema de referencia de la cámara e y la posición de cada punto a lo largo del eje de la expansión. Por lo tanto, ξ es la distancia del punto considerado a la boca de tobera. C_1 y C_2 son dos parámetros del ajuste. El parámetro C_2 indicaría la posición del origen de la expansión si la función tipo representara bien la temperatura rotacional por debajo de 300 μm . Este no es el caso, por lo que C_2 no tiene significado físico.

Asignaremos a los valores generados con el ajuste unas incertidumbres iguales al máximo del doble de la separación entre ellos y los valores experimentales correspondientes y el doble de las incertidumbres experimentales. De este modo se evita la aparición de puntos con error cero, se introduce información experimental, se hace que todos los puntos experimentales estén contenidos dentro de los intervalos de error y se consigue una función de temperatura rotacional más suave.

10.3.3.3. Las poblaciones y sus derivadas

Las derivadas temporales de las poblaciones se pueden escribir en función de sus derivadas espaciales y de la velocidad de expansión, v_{exp} (Sección 10.3.3.8):

$$\frac{dP_i}{dt} = v_{\text{exp}}(\xi) \frac{dP_i}{d\xi} \quad (10.11)$$

La determinación precisa de las derivadas de las poblaciones es una de las tareas más complejas de toda la reducción de datos. La MEQ (Ec. 8.13) depende de las tasas de transferencia a una temperatura traslacional determinada. Suponiendo que únicamente los niveles con $J \leq 1$ ($E_1 \simeq 3.98 \text{ cm}^{-1}$) del N_2 son accesibles colisionalmente, no existen transiciones y las poblaciones se mantienen constantes. Si son accesibles colisionalmente los niveles con $J \leq 2$ ($E_2 \simeq 11.94 \text{ cm}^{-1}$) hay 9 procesos colisionales que involucran transiciones en una o en las dos moléculas, considerándolas indistinguibles. En el caso de que los niveles accesibles sean aquéllos con $J \leq 3$ ($E_3 \simeq 23.88 \text{ cm}^{-1}$), el número de procesos es 26. El número de procesos posibles crece muy rápidamente con la temperatura traslacional, siendo necesario incluir en la MEQ una gran cantidad de tasas de transferencia (ver Sección 10.3.3.9). Por lo tanto, las poblaciones son funciones extremadamente complejas que pueden presentar pequeñas oscilaciones con grandes derivadas.

A partir de una nube de puntos es posible realizar un buen ajuste utilizando una función tipo, si los datos experimentales son lo suficientemente precisos y si la función describe bien el fenómeno estudiado. Pero un buen ajuste de la nube de puntos no implica que la derivada de la función ajustada sea realista, pudiendo llegar a presentar grandes desviaciones con respecto a la derivada real. Por lo tanto, es necesario asegurarse de que las derivadas obtenidas de este modo son lo suficientemente precisas. En este caso, sería posible utilizar las poblaciones generadas con el ajuste de la temperatura rotacional (que llamaremos en adelante *poblaciones teóricas*; Ec. 10.7) para calcular las derivadas.

La utilización en un ajuste de una función tipo determinada supone la imposición de una correlación entre los diferentes puntos de la magnitud a ajustar. Sin embargo, es posible que esta correlación sea excesiva siendo conveniente eliminar todas las restricciones superfluas. Con el siguiente procedimiento, que llamaremos *ajuste puntual*, es posible lograr la eliminación parcial de esas restricciones:

1. se supone una población dada y elijamos un punto de la expansión,
2. se escoge un conjunto de puntos en torno a él,
3. se utiliza un polinomio cuyo grado depende del número de puntos que forman el conjunto elegido para ajustar la población en ese rango, y
4. se calcula con ese ajuste el valor de la población (que llamaremos *población puntual*) y de su derivada en el punto central.
5. Se pasa al siguiente punto y se repite el proceso.

Este método permite obtener la información sobre el valor de las poblaciones y de sus derivadas en cada punto, estando éstas afectadas únicamente por su entorno próximo. Una ventaja adicional de este tipo de ajustes es que utilizan una función tipo lineal en los parámetros de la función, pudiéndose programar fácilmente. El número de puntos mínimo de cada entorno no debe ser demasiado pequeño para evitar que las poblaciones ajustadas y las derivadas estén afectadas por el ruido experimental. Las incertidumbres de las poblaciones puntuales se pueden calcular del mismo modo que las de la temperatura rotacional.

Suponiendo que

$$P_i(\xi = \xi_1) = \alpha_0 + \alpha_1(\xi_1 - \xi_0) + \alpha_2(\xi_1 - \xi_0)^2 + \dots, \quad (10.12)$$

donde α es el vector de parámetros del ajuste, ξ_0 es el supuesto origen de la expansión (que tomaremos en general como 0) y ξ_1 es el punto en torno al cual se ajusta el polinomio, se tiene que

$$\left. \frac{dP_i}{d\xi} \right|_{\xi=\xi_1} = \alpha_1 + 2\alpha_2(\xi_1 - \xi_0) + 3\alpha_3(\xi_1 - \xi_0)^2 + \dots. \quad (10.13)$$

Utilizando el método de propagación de errores,

$$\Delta \left(\left. \frac{dP_i}{d\xi} \right|_{\xi=\xi_1} \right) = \Delta\alpha_1 + 2|\xi_1 - \xi_0| \Delta\alpha_2 + 3|\xi_1 - \xi_0|^2 \Delta\alpha_3 + \dots, \quad (10.14)$$

donde $\Delta\alpha$ son los errores estadísticos de los parámetros del ajuste.

Para demostrar que las derivadas de las poblaciones teóricas y las puntuales son compatibles entre sí, se deben:

1. comparar las poblaciones teóricas con las experimentales,
2. obtener las derivadas de las poblaciones teóricas,
3. hacer un ajuste puntual de las poblaciones experimentales,
4. hallar las derivadas puntuales, y
5. comparar estas derivadas con las anteriores.

Como las derivadas de las poblaciones puntuales deben ser mucho más realistas que las de las teóricas, el asegurarse de la compatibilidad de ambas supone que las poblaciones teóricas conservan la mayor parte de la información global capturada a través de la medición experimental de las poblaciones. Se pueden ver las comparaciones en la Figura 10.7.

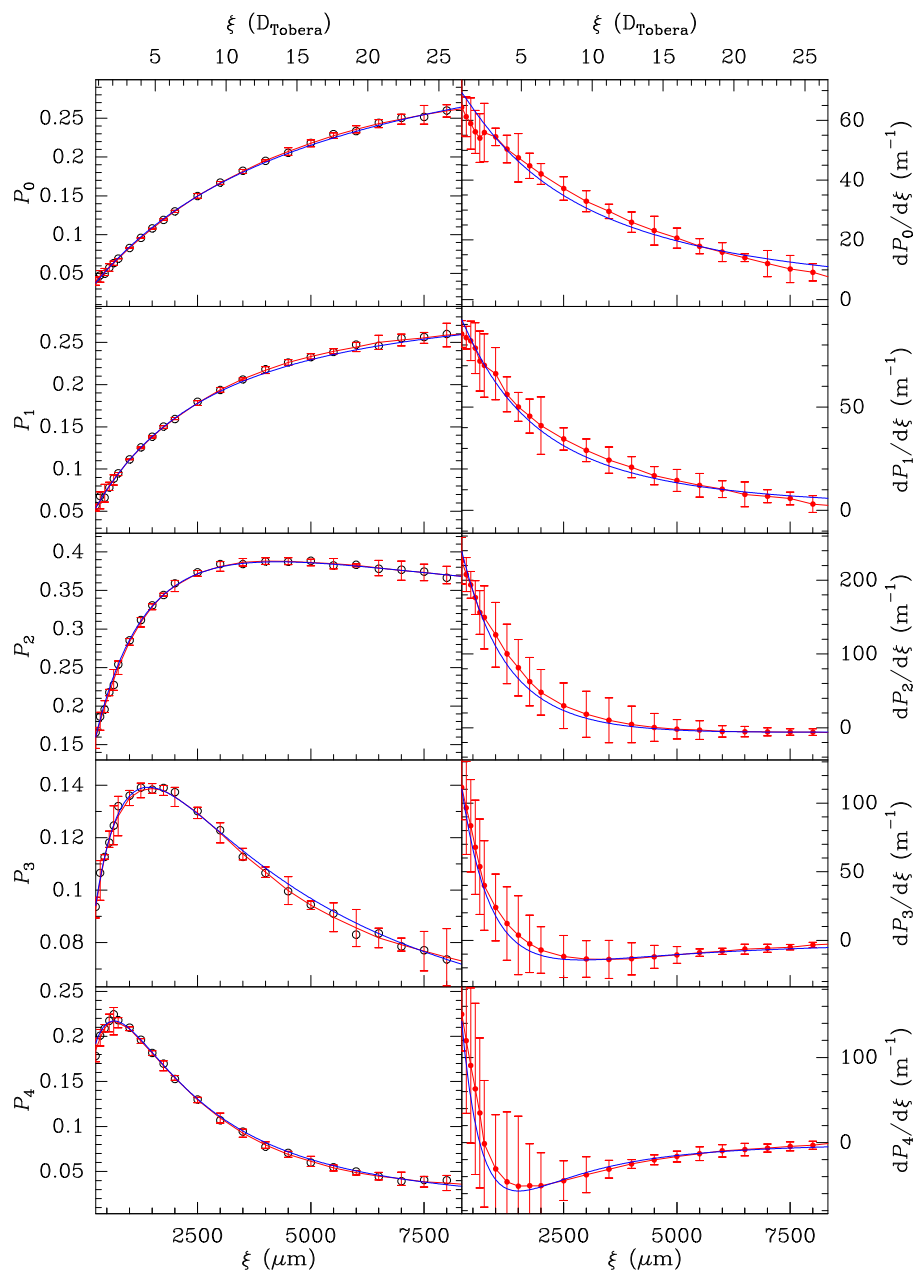


FIGURA 10.7.— Comparación entre las poblaciones experimentales, las calculadas a través de la Ec. 10.15 y derivadas del ajuste puntual. La Figura muestra las poblaciones de los niveles $J = 0, 1, 2, 3$ y 4 del N_2 y sus derivadas a lo largo del eje en una expansión con una presión en precámara de 500 mbar entre 300 y 8000 μm . Las gráficas de la izquierda corresponden a las poblaciones. Los círculos huecos representan los datos derivados de la integración de las líneas rotacionales de los espectros observados con la Ec. 10.8. Las curvas rojas son los ajustes de las poblaciones realizados puntualmente con entornos de 9 puntos ($4 + 1 + 4$; ver texto). Las curvas azules son las poblaciones obtenidas con la Ec. 10.15 y utilizando el ajuste de la temperatura rotacional. Las barras de error representan los errores de las poblaciones puntuales. Las gráficas de la derecha corresponden a las derivadas de las poblaciones, teniendo los puntos, las curvas y los colores el mismo significado que en las gráficas de la izquierda. Las derivadas de las poblaciones calculadas con la Ec. 10.15 están para todos los niveles y en todo el rango espacial dentro de los intervalos de error de los puntos derivados con el ajuste puntual.

Esta Figura indica que las poblaciones teóricas son una buena aproximación a las poblaciones experimentales. Esta compatibilidad es esperable ya que el ajuste de las temperaturas rotacionales es bueno (ver Figura 11.2) y las poblaciones son una transformación de esta función. En cuanto a las derivadas, existen ciertas zonas de la expansión en las que se aprecian diferencias entre las derivadas de las poblaciones puntuales y las de las teóricas, pero estas desviaciones son siempre menores que los errores de las derivadas de las poblaciones puntuales. En consecuencia, se concluye que es posible utilizar el ajuste de la temperatura rotacional para generar las poblaciones y sus derivadas en las expansiones estudiadas.

Para obtener las poblaciones a partir de la temperatura rotacional se utiliza:

$$P_J = \frac{g_J (2J + 1)}{Z_r} e^{-\beta E_J / T_r}, \quad (10.15)$$

donde $E_J = BJ(J + 1)$ en la aproximación del rotor rígido. La función de partición molecular es aproximadamente igual a la rotacional en las condiciones del experimento (Sección 10.1.2). En consecuencia:

$$Z \simeq Z_r = \sum_{J=0}^{\infty} g_J (2J + 1) e^{-\beta E_J / T_r}. \quad (10.16)$$

En el caso del N_2 , la función de partición depende de la simetría de espín y

$$\begin{aligned} Z_{ro} &= \frac{3}{g_o} \sum_{J_{\text{par}}}^{\infty} g_J (2J + 1) e^{-\beta E_J / T_r} \\ Z_{rp} &= \frac{3}{g_p} \sum_{J_{\text{impar}}}^{\infty} g_J (2J + 1) e^{-\beta (E_J - E_1) / T_r}, \end{aligned} \quad (10.17)$$

donde el subíndice o indica orto, el p para y la constantes $g_o = 2$ y $g_p = 1$. Nótese que esta definición de las funciones de partición implica que el número de moléculas orto es $2/3$ del total y el de molécula para, $1/3$. Por razones de comodidad se utilizará el subíndice s ($= o, p$) al referirse a estas dos especies al mismo tiempo y $E_J^o = E_J$ y $E_J^p = E_J - E_1$.

La expresión de los errores asociados a las poblaciones calculadas de esta forma es más complicada:

$$\begin{aligned} \frac{dP_J}{d\xi} &= g_J (2J + 1) \frac{d}{d\xi} \frac{e^{-\beta E_J^s / T_r}}{Z_{rs}} \\ &= g_J (2J + 1) e^{-\beta E_J^s / T_r} \frac{\beta E_J^s Z_{rs} / T_r^2 - \partial Z_{rs} / \partial T_r}{Z_{rs}^2} \frac{dT_r}{d\xi} \\ &= P_J \left[\frac{\beta E_J^s}{T_r^2} - \frac{1}{Z_{rs}} \frac{\partial Z_{rs}}{\partial T_r} \right] \frac{dT_r}{d\xi}, \end{aligned} \quad (10.18)$$

donde

$$\begin{aligned} \frac{1}{Z_{rs}} \frac{\partial Z_{rs}}{\partial T_r} &= \frac{1}{Z_{rs}} \frac{\partial}{\partial T_r} \frac{3}{g_s} \sum_{J_{\text{par/impar}}} g_J (2J + 1) e^{-\beta E_J^s / T_r} \\ &= \frac{1}{T_r^2} \frac{3}{g_s} \sum_{J_{\text{par/impar}}} g_J \frac{(2J + 1)}{Z_{rs}} \beta E_J^s e^{-\beta E_J^s / T_r} \\ &= \frac{1}{T_r^2} \frac{3}{g_s} \sum_{J_{\text{par/impar}}} \beta E_J^s P_J \\ &= \frac{\langle \beta E_J^s \rangle_s}{T_r^2}, \end{aligned} \quad (10.19)$$

siendo $\langle \beta E_J^s \rangle_s$ el valor esperado de la energía rotacional en unidades de temperatura según la distribución estadística dada por las poblaciones de los niveles rotacionales de tipo s (orto o para). Por lo tanto,

$$\frac{1}{P_J} \frac{dP_J}{d\xi} = \frac{\beta E_J^s - \langle \beta E_J^s \rangle_s}{T_r^2} \frac{dT_r}{d\xi}. \quad (10.20)$$

Considerando la función tipo elegida para representar la temperatura rotacional (Ec. 10.10) y utilizando la aproximación del rotor rígido,

$$\frac{1}{P_J} \frac{dP_J}{d\xi} = -\beta B [J(J+1) - \langle J(J+1) \rangle_s] \frac{T^* - T_r}{T_r^2} \frac{C_1}{(\xi + C_2)^2}. \quad (10.21)$$

El cálculo de errores se puede hacer con el método de propagación:

$$\begin{aligned} \Delta \left(\frac{dP_J}{d\xi} \right) = & \frac{1}{P_J} \left| \frac{dP_J}{d\xi} \right| \Delta P_J + \left| \frac{dP_J}{d\xi} \frac{2T^* - T_r}{T^* - T_r} \right| T_r \Delta T_r + \left| \frac{1}{C_1} \frac{dP_J}{d\xi} \right| \Delta C_1 \\ & + \left| \frac{2}{\xi + C_2} \frac{dP_J}{d\xi} \right| \Delta C_2 + P_J \beta B \left| \frac{C_1}{(\xi + C_2)^2} \frac{T^* - T_r}{T_r^2} \right| \Delta \langle J(J+1) \rangle_s, \end{aligned} \quad (10.22)$$

donde $\Delta \langle J(J+1) \rangle_s = (3/g_s) \sum_{J_{\text{par/impar}}} J(J+1) \Delta P_J$.

10.3.3.4. Densidades relativas

Los espectros de los puntos donde se cambiaron las condiciones de observación están registrados con ambas. Esta maniobra permite conocer el efecto que dicho cambio introduce en la intensidad de la señal registrada, escalar las intensidades y conseguir un conjunto de datos que describa la función densidad de forma continua y coherente, excepto por un factor de escala global.

Durante este proceso, también deben escalarse los errores de cada punto para adaptarlo a sus nuevas condiciones. En los puntos donde se cambian las condiciones de observación existen dos errores distintos, tomándose el mayor de ellos como opción más sensata.

10.3.3.5. Determinación de las densidades absolutas

El procedimiento seguido en el registro de los espectros relacionados con las densidades absolutas (Sección 10.3.2.3) está basado en las dos expresiones siguientes (Sección 10.3.2):

$$I_{2331} = Kn, \quad (10.23)$$

$$p = nk_B T_{\text{amb}}, \quad (10.24)$$

donde I_{2331} es la intensidad integrada de la rama Q de la transición rovibracional $v = 1 \leftarrow 0$, K una constante multiplicativa, n la densidad numérica del gas, T_{amb} la temperatura ambiente y p la presión del gas (ideal). La ecuación de los gases perfectos es una muy buena aproximación a la ecuación de estado del gas en estático, puesto que la medida de referencia se suele tomar a presiones menores de 50 – 100 mbar. Utilizando las dos anteriores expresiones se pueden relacionar las condiciones físicas del gas en estático observado en la cámara de expansiones con la intensidad de la rama Q que produce. Es decir, se puede determinar la constante K , utilizándose posteriormente para calcular la densidad en el punto de la expansión registrado en las mismas condiciones de observación.

$$\frac{I_{2331}^{\text{exp}}}{n^{\text{exp}}} = \frac{I_{2331}^{\text{est}}}{p/k_B T_{\text{amb}}} \implies n^{\text{exp}} = \frac{p}{k_B T_{\text{amb}}} \frac{I_{2331}^{\text{exp}}}{I_{2331}^{\text{est}}}, \quad (10.25)$$

donde los superíndices *exp* y *est* indican en expansión y en estático, y la presión p está expresada en Pa.

El procedimiento experimental conlleva el registro de varias series de espectros en un mismo punto de la expansión. Este conjunto de datos permite estimar la intensidad promedio para el punto de la expansión elegido y una incertidumbre asociada. El cálculo de ésta se puede realizar utilizando la desviación típica de los promedios de las intensidades de cada serie, σ_{prom} , y el promedio de las desviaciones típicas de las intensidades de todas las series, $\langle \sigma_S \rangle$. Con estos datos, la incertidumbre de la intensidad $\sigma = \sqrt{\sigma_{\text{prom}}^2 + \langle \sigma_S \rangle^2}$.

Las incertidumbres de la densidad se pueden obtener mediante el método de propagación de errores, cuyo resultado es $\varepsilon_r(n^{\text{exp}}) = \varepsilon_r(p) + \varepsilon_r(T_{\text{amb}}) + \varepsilon_r(I_{2331}^{\text{exp}}) + \varepsilon_r(I_{2331}^{\text{est}})$, siendo $\varepsilon_r(A)$ el error relativo de la magnitud A .

10.3.3.6. Escalado de los perfiles de densidad relativa y absoluta, y ajuste del perfil de densidades

Para escalar el perfil de densidades relativas basta con minimizar la cantidad siguiente:

$$\chi^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \underbrace{\left(\frac{1}{n_i^{\text{abs}}} \right)^2}_{w_i} \left(n_i^{\text{abs}} - F n_i^{\text{rel}} \right)^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left(1 - F \frac{n_i^{\text{rel}}}{n_i^{\text{abs}}} \right)^2, \quad (10.26)$$

donde m es el número de puntos elegidos para determinar las densidades absolutas, n^{abs} , n^{rel} son las densidades relativas asociadas a esos puntos y F es el factor de escala a determinar. La utilización del peso $w_i = 1/(n_i^{\text{abs}})^2$ en la función χ^2 es necesaria porque la variación en las densidades existente entre los puntos cercanos a la tobera y los lejanos es de varios órdenes de magnitud. En estas condiciones, una pequeña modificación en las densidades cerca de la tobera supone un cambio importante en aquéllas lejos de la tobera. El peso utilizado concede la misma importancia a todos los puntos considerados. Por lo tanto,

$$F = \frac{\sum_{i=1}^m n_i^{\text{rel}}/n_i^{\text{abs}}}{\sum_{i=1}^m (n_i^{\text{rel}}/n_i^{\text{abs}})^2}. \quad (10.27)$$

Las Ecs. 9.1 y 9.2 permiten describir la densidad en función de la distancia al origen de la expansión (Capítulo 9). Sin embargo, esas expresiones son complicadas siendo preferible utilizar una función que dependa de la menor cantidad posible de parámetros y que proporcione un buen ajuste a los datos experimentales. Esta función es:

$$n(\xi) = \frac{C_3}{(\xi + C_4)^2}, \quad \xi \geq 1250 \mu\text{m}. \quad (10.28)$$

En el Capítulo 11 se verá que basta con considerar los puntos con distancias mayores a $1250 \mu\text{m}$ para obtener los resultados buscados en este trabajo. Al igual que con la temperatura rotacional, el error asignado a la densidad ajustada, n_i^a , correspondiente al punto ξ_i es también el máximo del valor $\Delta n_i = 2|n_i^a - n_i^e|$ y el doble de la desviación típica experimental de ese punto, si n_i^e es el valor de la densidad obtenida experimentalmente en ese punto.

Nótese que la constante C_4 en la anterior expresión representa al origen de la expansión mientras que en la Ec. 10.10 es la constante C_2 la que lo hace. En general, $C_2 \neq C_4$ pues las funciones tipo utilizadas para ajustar la temperatura rotacional y la densidad no representan bien los datos a distancias menores a $300 \mu\text{m}$. Al igual que en el caso de la Ec. 10.10, la constante C_4 tampoco tiene significado físico directo.

10.3.3.7. Temperatura traslacional

Utilizando los datos de la temperatura rotacional y de la densidad, se calcula la temperatura traslacional del gas considerando que éste se comporta isentrópicamente en la zona

de silencio (ver Capítulo 9, Ec. 9.6):

$$T_t(\xi) \simeq T_0 \left[\frac{T_0}{n_0} \frac{n(\xi)}{T_r(\xi)} \right]^{2/3}, \quad \xi \geq 1250 \mu\text{m}, \quad (10.29)$$

donde se ha tomado en cuenta que la función de partición rotacional del N_2 se puede aproximar por $Z \simeq T_r/\beta B$ en el rango de temperaturas rotacionales del gas a lo largo de la expansión, y que T_0 y n_0 son los valores de la temperatura (rotacional y traslacional) y la densidad en precámara. La temperatura T_0 no ha sido medida experimentalmente pero, debido a la construcción del montaje experimental, puede ser considerada igual a T_{amb} .

El cálculo de los errores de la temperatura traslacional se puede hacer mediante el procedimiento usual de propagación, es decir, $\varepsilon_r(T_t) = (2/3) [\varepsilon_r(n) + \varepsilon_r(T_r) + \varepsilon_r(n_0)] + (5/3) \varepsilon_r(T_0)$.

10.3.3.8. Velocidad de expansión

La velocidad de expansión del gas puede ser determinada considerando que se conserva la entalpía de la fuente (Maté et al., 1998). Así,

$$v_{\text{exp}}(\xi) = \sqrt{\frac{R}{W} [7T_0 - 5T_t(\xi) - 2T_r(\xi)]}, \quad (10.30)$$

siendo T_0 la temperatura en precámara, R la constante universal de los gases ($\simeq 8.3145 \text{ J K}^{-1}$) y W la masa molecular del N_2 ($\simeq 0.028 \text{ kg mol}^{-1}$). Los errores de esta magnitud también se pueden calcular por medio del método de propagación, dando como resultado que $\Delta v_{\text{exp}} = (R/W) v_{\text{exp}}^{-1} (7\Delta T_0/2 + 5\Delta T_t/2 + \Delta T_r)$.

10.3.3.9. Aplicación a la Ecuación Maestra

La expresión de la MEQ (Ec. 8.13):

$$\frac{dP_i}{dt} = n \sum_{j,l \leq m} [-P_i P_j k_{ij \rightarrow lm} + P_l P_m k_{lm \rightarrow ij}] Q_{ijlm} \quad (10.31)$$

con

$$Q_{ijlm} = [1 + \delta_{ij} (1 - \delta_{li}) (1 - \delta_{mi})] [1 - \delta_{li} (1 - \delta_{ij})] [1 - \delta_{mi} (1 - \delta_{ij})]. \quad (10.32)$$

La reducción de los datos experimentales proporciona la densidad de partículas, n , y las poblaciones, P_i , a lo largo de toda la expansión, pudiéndose evaluar las tasas de transferencia colisional.

La suma que aparece en la MEQ suele ser bastante complicada de escribir debido a la gran cantidad de procesos colisionales posibles. Pero no todas las tasas de transferencia son independientes a causa del principio del balance detallado:

$$k_{ij \rightarrow lm} = k_{lm \rightarrow ij} \frac{(2l+1)(2m+1)}{(2i+1)(2j+1)} e^{(E_i+E_j-E_l-E_m)/k_B T_r}. \quad (10.33)$$

Al intercambiar la tasa $k_{lm \rightarrow ij}$ por su expresión integral (Ec. 8.15),

$$k_{lm \rightarrow ij}(T) = \frac{\langle v \rangle}{(k_B T)^2} \int_{E_s}^{\infty} dE E \sigma_{lm \rightarrow ij}(E) e^{-E/k_B T_t} \quad (10.34)$$

se obtiene que

$$k_{ij \rightarrow lm} = \frac{(2l+1)(2m+1)}{(2i+1)(2j+1)} \frac{\langle v \rangle}{(k_B T)^2} \int_{E_s}^{\infty} dE E \sigma_{lm \rightarrow ij}(E) e^{(-E+E_i+E_j-E_l-E_m)/k_B T_t}, \quad (10.35)$$

siendo E la energía de la colisión ($E > 0$). En consecuencia, suponiendo un proceso ideal en el que toda la energía cinética en la colisión se invierte en producir transiciones rotacionales y considerando que la energía rotacional total inicial es mayor que la final ($E_i + E_j > E_l + E_m$; procesos de decaimiento global), la exponencial de la integral desaparece haciendo que $k_{ij \rightarrow lm} \propto T_t^{-2}$. En el caso más realista donde sólo una parte de la energía colisional se invierte en producir transiciones rotacionales, la dependencia de $k_{ij \rightarrow lm}$ con la temperatura se suaviza significativamente, al contrario que la de $k_{lm \rightarrow ij}$ donde la exponencial $e^{-E/k_B T_t}$ introduce una fuerte dependencia con la temperatura.

Por lo tanto, las tasas de decaimiento global, $k_{ij \rightarrow lm}^{\text{down}}$, son más manejables que las tasas de excitación global, $k_{ij \rightarrow lm}^{\text{up}}$. Parece entonces conveniente reescribir la MEQ (RMEQ) en función únicamente de las tasas de decaimiento global:

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_{\mu\nu\rho\sigma} a_{\mu\nu\rho\sigma} k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down}}, \quad (10.36)$$

donde los coeficientes $a_{\mu\nu\rho\sigma}$ dependen de la densidad, las poblaciones de los niveles y exponenciales del tipo $e^{(E_i + E_j - E_l - E_m)/k_B T_t}$. Los índices de la suma en la expresión anterior, μ, ν, ρ y σ , aparecen por la imposibilidad de dar relaciones sencillas entre los índices i, j, l y m que permitan expresar convenientemente la suma en función de las tasas de transferencia de decaimiento global. Los números rotacionales i, j, l y m han de cumplir que $i(i+1) + j(j+1) - l(l+1) - m(m+1) > 0$ y $l \leq m$, habiendo considerado los niveles (i, j) como iniciales. Las condiciones anteriores no imponen restricciones a pares de números cuánticos rotacionales sino a todos a la vez. En consecuencia, es posible encontrar procesos del tipo $ij \rightarrow lm$ como $03 \rightarrow 21$ ó $22 \rightarrow 02$ que cumplan la condición impuesta.

Las ecuaciones de la RMEQ (Ec. 10.36) para el N_2 cuando la temperatura traslacional es tal que únicamente los niveles rotacionales con $J \leq 2$ están poblados significativamente son:

$$\begin{aligned} \dot{P}_0 &= a_{2000}k_{20 \rightarrow 00} + a_{2200}k_{22 \rightarrow 00} + a_{2101}k_{21 \rightarrow 01} + a_{2202}k_{22 \rightarrow 02}, \\ \dot{P}_1 &= 0, \\ \dot{P}_2 &= -\dot{P}_0, \end{aligned} \quad (10.37)$$

cuyos coeficientes $a_{\mu\nu\rho\sigma}$ toman las formas:

$$\begin{aligned} a_{2000} &= n \left[-5P_0P_0e^{-6\beta B/T_t} + P_2P_0 \right], \\ a_{2101} &= n \left[-5P_0P_1e^{-6\beta B/T_t} + P_2P_1 \right], \\ a_{2202} &= n \left[-5P_0P_2e^{-6\beta B/T_t} + P_2P_2 \right], \\ a_{2200} &= n \left[-50P_0P_0e^{-12\beta B/T_t} + 2P_2P_2 \right]. \end{aligned} \quad (10.38)$$

Cuando el número J del nivel rotacional máximo poblado aumenta, la escritura de las ecuaciones se complica extraordinariamente pudiéndose introducir errores en ellas con facilidad. Por ello, es conveniente utilizar un programa de ordenador (MEQNEW, desarrollado por S. Montero; ver Sección 10.3.3.10) para tratar el problema a temperaturas mayores de 10 – 15 K. Cuando el valor de los números cuánticos rotacionales es ≤ 3 existen 11 tasas de transferencia necesarias (*down*). Cuando $J \leq 4$, 33, cuando $J \leq 5$, 65, cuando $J \leq 7$, 217 y cuando $J \leq 10$, se necesitan 822 tasas de transferencia colisional diferentes.

Inicialmente se podría pensar en resolver de forma aproximada la ecuación maestra, convertida al utilizar los datos experimentales en un sistema de ecuaciones algebraico infinito cuyas variables son las tasas de transferencia. Para obtener los valores de las tasas de transferencia sería necesario utilizar varias expansiones a diferentes presiones, a fin de conseguir que los coeficientes $a_{\mu\nu\rho\sigma}$ fueran distintos para cada expansión a una misma temperatura. Desafortunadamente, al aumentar tan rápidamente con la temperatura el número

de tasas involucradas en el sistema de ecuaciones, la variación sufrida por los coeficientes $a_{\mu\nu\rho\sigma}$ entre una expansión y otra no sería suficiente para proponer sistemas de ecuaciones que tuvieran soluciones precisas. En consecuencia, este método sólo es viable a temperaturas pequeñas ($T_t \lesssim 10$ K).

Sin embargo, es posible imponer cotas de validez a las $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down}}$ generadas mediante de los estudios numéricos de estas colisiones (ver Capítulo 11). Este tipo de estudios permiten calcular las secciones eficaces de colisión inelásticas en función de la energía de colisión, utilizando un potencial intermolecular dado y una base truncada de autoestados moleculares. A partir de las secciones eficaces de colisión se pueden obtener las tasas de transferencia en función de la temperatura traslacional. Utilizando estas tasas de transferencia teóricas junto con la densidad y las poblaciones derivadas experimentalmente se puede calcular el miembro de la derecha (RHT) de la RMEQ (Ec. 10.36) para la población P_i , siendo el miembro de la izquierda (LHT) puramente experimental. Si las tasas de transferencia calculadas numéricamente fueran iguales a las reales, los miembros izquierdo y derecho de la RMEQ también lo serían. Por lo tanto, la relación entre los dos miembros de la RMEQ para cada nivel rotacional i (en adelante *factores de escalado*), R_i , definidos como $R_i = (\text{LHT})_i / (\text{RHT})_i$, proporciona una medida de la calidad de las tasas de transferencia calculadas numéricamente, así como su escalado a valores compatibles con el experimento.

10.3.3.10. Determinación de las derivadas temporales de las poblaciones con el código MEQNEW

El cálculo de las derivadas temporales de las poblaciones con el código MEQNEW es muy importante para la posterior derivación de los resultados de este trabajo. Por ello, es necesario dedicarle más tiempo para profundizar en su funcionamiento.

El programa MEQNEW permite calcular las derivadas temporales de las poblaciones utilizando las propias poblaciones y las tasas de transferencia a través de la RMEQ (Ec. 10.36). La RMEQ es una suma complicada a consecuencia de las simetrías del tensor Q_{ijlm} ($Q_{ijlm} = Q_{ijml}$ y $Q_{ijlm} = Q_{jiml}$) y de las propias tasas de transferencia ($k_{ij \rightarrow lm}$, $l \leq m$). Las moléculas de N_2 participantes en una colisión pueden ser tratadas como distinguibles o indistinguibles. En principio, sería posible determinar si las moléculas son orto o para antes y después de ésta observando el espín de los núcleos. Las colisiones entre moléculas orto (J par) y para (J impar) serían procesos entre moléculas distinguibles debido a que no es posible una conversión orto-para en las condiciones del experimento. En los experimentos expuestos en esta Tesis, el tiempo de vuelo de una molécula es demasiado corto para que se produzca esta conversión espontáneamente y los fenómenos físicos prevalecientes en las expansiones no pueden producir dichas transformaciones. Sin embargo, en las colisiones entre moléculas con la misma estadística de espín (orto o para) no sería posible distinguirlas después de la colisión, comportándose como moléculas indistinguibles.

Es común proporcionar las tasas de transferencia $k_{ij \rightarrow lm}$ para las colisiones entre moléculas indistinguibles de la forma $k_{ij \rightarrow lm}^{\text{ind}} \simeq k_{ij \rightarrow lm}^d + k_{ij \rightarrow ml}^e$ (Rabitz & Lam, 1975). Esta expresión se obtiene de cálculos mecanocuánticos, donde la sección eficaz de colisión toma la forma (Huo & Green, 1996)

$$\sigma_{ij \rightarrow lm}^{\text{ind}} = \sigma_{ij \rightarrow lm}^d + \sigma_{ij \rightarrow ml}^e + (W^+ - W^-) \sigma_{ij;lm}^{de}, \quad (10.39)$$

siendo $\sigma_{ij \rightarrow lm}^d$ y $\sigma_{ij \rightarrow ml}^e$ los términos *directo* y *de intercambio*, y $(W^+ - W^-) \sigma_{ij;lm}^{de}$ un término de interferencia. En el caso del N_2 , este último término es despreciable (Huo & Green, 1996).

La suma de la RMEQ (Ec. 10.36) debe cumplir dos condiciones importantes:

1. debe ser nula cuando $T_t = T_r$, y
2. la suma de las derivadas temporales de las poblaciones debe ser también nula, es

decir,

$$\sum_i \frac{dP_i}{dt} = n \sum_{ij, l \leq m} [-P_i P_j k_{ij \rightarrow lm} + P_l P_m k_{lm \rightarrow ij}] Q_{ijlm} = 0. \quad (10.40)$$

La primera condición se cumple inmediatamente al considerar el principio del balance detallado. La segunda implica la conservación del número de moléculas en el volumen de muestreo.

10.4. Problemas experimentales detectados

Durante este estudio han aparecido problemas instrumentales y experimentales no conocidos inicialmente, haciendo necesario el prescindir de ciertas medidas que se pensaban correctas. A continuación se exponen brevemente estos problemas.

1. *Las primeras líneas de cada tramo espectral (fotografía) cerca de la tobera presentan intensidades perturbadas con respecto a las esperadas.* Las intensidades de estas líneas son mayores que las que les corresponderían según los *plots* de Boltzmann. Este efecto afecta a la línea $J = 0$ modificando sustancialmente la normalización de las poblaciones al quedar perturbada la constante de normalización con respecto al valor correcto. Los *plots* de Boltzmann sugieren que el resto de las líneas están bien pues dan lugar a una recta en la zona de líneas con J pequeño. Este efecto parece proceder de algún reflejo que incide en el borde de la región sensible de la CCD correspondiente a las frecuencias pequeñas. Los experimentos realizados dirigidos a la determinación de la eficiencia de detección de la región sensible de la CCD sugieren la existencia de pequeñas variaciones aleatorias a lo largo del chip, pero no lo suficientemente importantes como para producir lo observado. No ha sido posible corregir este error siendo necesario evitar el uso de las líneas perturbadas durante la reducción de los datos. Se han utilizado las líneas no perturbadas para predecir el valor de las intensidades de las líneas perturbadas a través de los *plots* de Boltzmann, y normalizar las poblaciones posteriormente.
2. *Los espectros registrados a distancias $\lesssim 300 \mu\text{m}$ no son válidos.* Cuando la región de muestreo está en la zona señalada parte de la luz dispersada por el gas es bloqueada por la tobera, reduciendo el ángulo sólido efectivo de colección de manera incontrolada. Estas pérdidas introducen un sesgo en la señal primando la contribución del gas más frío y menos denso contenido en la región de muestreo. En consecuencia, al estar observando una zona de la expansión con gradientes de densidad y temperatura muy intensos, las condiciones físicas derivadas de los espectros están falseadas y deben ser descartadas.

Capítulo 11

Resultados

Una vez expuestos el montaje experimental y la metodología en el Capítulo 10, se presentan los resultados de los experimentos realizados y la información derivada de estos.

El conjunto de experimentos llevados a cabo consta de cuatro expansiones supersónicas de N_2 con presiones en precámara nominales de 200, 500, 1000 y 2000 mbar. Primero mostraremos las poblaciones y la temperatura rotacional, seguido de la determinación de la función densidad a lo largo de la expansión. Posteriormente obtendremos la temperatura traslacional, el parámetro rotura de equilibrio, la velocidad de expansión y las derivadas temporales de las poblaciones. Por último, utilizaremos los datos generados a partir de los experimentos para escalar un conjunto de tasas de transferencia colisional calculadas numéricamente.

11.1. Condiciones generales de las expansiones realizadas

Antes de comenzar con la exposición de los resultados experimentales, es conveniente dar una visión general de las cuatro expansiones. Adicionalmente es posible encontrar una transcripción del cuaderno de laboratorio junto con los resultados numéricos obtenidos para las cuatro expansiones en el Apéndice D.

Todas las expansiones fueron realizadas con el montaje experimental descrito en el Capítulo 10 utilizando N_2 con una pureza del 99.999 % y una tobera de $313 \mu m$ de diámetro. En todos los experimentos el láser operó en modo potencia a 5.8W y una longitud de onda de 514.5 nm. Se pueden encontrar las condiciones experimentales en la Tabla 11.1.

11.2. Poblaciones y temperatura rotacional

En la Sección 10.3.3.1 describimos el método general utilizado para la obtención de las poblaciones experimentales a partir de las intensidades de las líneas rotacionales observadas, obtenidas según la metodología expuesta en la Sección 10.3.2.3. Posteriormente, en las Secciones 10.3.3.2 y 10.3.3.3 indicamos la forma de obtener la temperatura rotacional (y su ajuste) para cada expansión y hablamos sobre la compatibilidad entre las poblaciones experimentales y las generadas a través de la temperatura rotacional ajustada. Por lo tanto, usaremos las poblaciones obtenidas del ajuste de T_r por ser más manejables.

11.2.1. Espectros rotacionales e intensidades

Inicialmente disponemos de una serie de espectros Raman-Stokes para cada una de las expansiones (ver Figura 11.1) de los que es posible obtener las intensidades de las líneas y su respectivo error para cada uno de los puntos de la expansión elegidos. En la Tabla 11.2 se puede encontrar una muestra de los datos referidos a las intensidades para fines in-

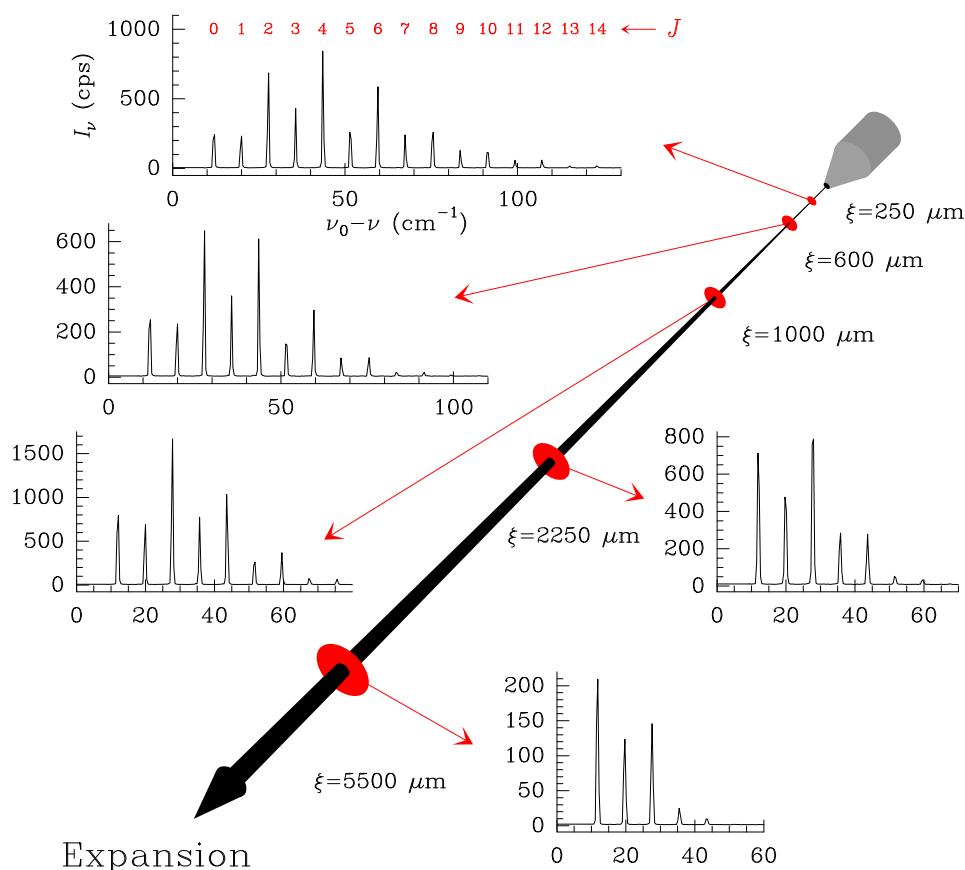


FIGURA 11.1.— Espectros rotacionales registrados en la expansión de 2000 mbar. La Figura muestra los espectros rotacionales en 5 puntos a lo largo de la expansión. En el eje de las abscisas de los espectros se representa la frecuencia del espectro rotacional en cm^{-1} . En el eje de las ordenadas se representa la intensidad registrada para cada frecuencia en cps (cuentas/segundo). Las condiciones de observación en cada punto son distintas (ver Apéndice D) por lo que no existe relación entre las intensidades de las líneas de espectros diferentes. La secuencia de los espectros permite observar el enfriamiento rotacional del gas a lo largo de la expansión, desplazándose el máximo de intensidad hacia frecuencias pequeñas al aumentar la distancia a la boca de tobera. A distancias grandes de la tobera la contribución de las líneas con valores grandes de J se hace despreciable. Cerca del disco de Mach ($\xi_M \simeq 22000 \mu\text{m}$) únicamente son visibles las líneas $J = 0, 1$ y 2 .

TABLA 11.1.– Condiciones experimentales de las expansiones de N₂

Expansión	200 mbar	500 mbar	1000 mbar	2000 mbar
Fechas (2005)	25-27 Oct	20, 21, 24 Oct	5, 7, 9, 12 Dic	13-16 Dic
p_{atm} (mbar)	—	—	936-950	940-950
Δp_{atm} (mbar)	—	—	0.05-0.10	0.05-0.20
p_0 (mbar)	199.5-201.1	499.25-501.55	999.7-1003.4	1997-2003
Δp_0 (mbar)	0.05-1.00	0.05-1.00	0.1-0.6	4
p_r (mbar)	0.03	0.05	0.09	0.15
Δp_r (mbar)	0.01	0.01	0.01	0.01
T_{amb} (K)	295	295.0-295.5	296.0-297.0	296.5-298.0
ΔT_{amb} (K)	0.5	0.5	0.5	0.5
z_M (μm)	17000	21000	22000	24000

La Tabla muestra las condiciones experimentales impuestas en las cuatro expansiones de N₂. Primero se indican las fechas del año 2005 en las que se realizaron las sesiones experimentales correspondientes a cada expansión. Posteriormente, se presentan los rangos de las presiones atmosférica, en precámara y residual, y la temperatura ambiente prevalecientes durante todas las sesiones experimentales. Todas estas magnitudes vienen acompañadas con los errores asociados. Adicionalmente, se incluye la posición aproximada del disco de Mach en cada expansión.

formativos. El listado completo de los datos para las 4 expansiones está disponible en el Apéndice D.

TABLA 11.2.– Intensidades integradas de líneas rotacionales

ξ (μm)	I_0 (cps)	I_1 (cps)	I_2 (cps)	I_3 (cps)	I_4 (cps)
1000	338.6	266.9	591.9	272.5	397.5
	336.3	269.2	595.2	262.7	403.9
	338.9	265.5	597.6	268.6	406.3
	344.4	276.2	600.0	273.2	396.8
	340 ± 3	269 ± 5	596 ± 3	269 ± 5	401 ± 5
17500	10.82	4.50	4.162	0.00	0.89
	10.08	5.42	4.121	-0.16	0.53
	10.86	4.96	3.699	0.65	0.00
	10.30	4.53	4.021	0.82	0.20
	10.69	5.34	3.935	0.34	0.78
	10.19	4.29	4.178	-0.08	0.99
	11.36	5.65	3.756	0.35	-0.12
	10.6 ± 0.5	5.0 ± 0.5	3.98 ± 0.19	0.3 ± 0.4	0.5 ± 0.4

La Tabla muestra 6 columnas con datos relativos a la expansión de 1000 mbar. La primera columna contiene la distancia a la boca de tobera y las otras 5 a las intensidades integradas de las líneas $J = 0 \rightarrow 2$, $1 \rightarrow 3$, $2 \rightarrow 4$, $3 \rightarrow 5$ y $4 \rightarrow 6$ (columnas 2 – 6) de los espectros registrados. Las filas contienen las intensidades integradas de las líneas correspondientes expresadas en cuentas por segundo (cps) para cada distancia a la boca de tobera. Las filas en amarillo contienen la intensidad integrada del espectro promedio y su error (ambas cantidades expresadas en cps). El error ha sido calculado como la desviación típica de las intensidades integradas de los espectros individuales para cada línea.

Los niveles de ruido de los espectros son muy similares para cada línea. Las relaciones señal-ruido cerca de la tobera pueden llegar a ser de varios cientos mientras que lejos de ésta se degrada reduciéndose a varias decenas para las líneas con $J \leq 2$ y a valores menores

de 10 para las líneas con $J > 2$. En este último caso, la relación señal-ruido es pobre y el error relativo de las intensidades del espectro promedio puede llegar a ser $\simeq 100\%$. Por lo tanto, es recomendable obtener conclusiones utilizando únicamente líneas rotacionales con J pequeño ($J \leq 4$).

11.2.2. Temperatura rotacional

Hemos obtenido las temperaturas rotaciones según lo expuesto en el Capítulo 10. Los ajustes se pueden ver en la Figura 11.2. Para hacer los ajustes hemos descartado ciertos pun-

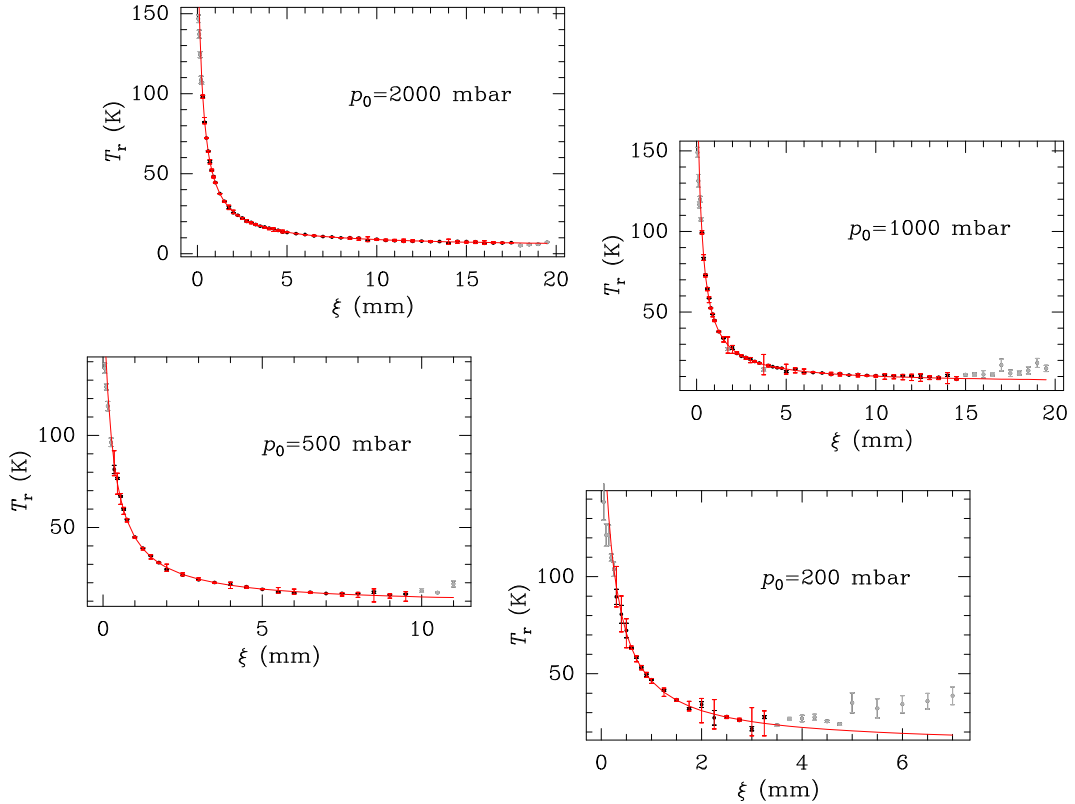


FIGURA 11.2.— Ajustes de la temperatura rotacional para las 4 expansiones. En la Figura se representan las temperaturas rotacionales obtenidas con los *plots* de Boltzmann (puntos negros y grises) con sus respectivos errores. La línea roja continua es el ajuste a esa nube de puntos utilizando la función tipo dada por la Ec. 10.10. El error de cada punto (2σ) obtenido mediante el ajuste es el valor máximo del doble del error estadístico y el doble de la separación entre el punto experimental y el ajustado. Los puntos negros son los utilizados para hacer los ajustes mientras que los grises no han sido considerados debido a (i) que se separan excesivamente de la nube de puntos, (ii) que están afectados por la onda de choque difusa, y (iii) que son puntos cuya distancia a la boca de tobera es $< 300 \mu\text{m}$ (ver Sección 10.4). En todas las expansiones los ajustes presentan desviaciones relativas con respecto a los datos experimentales menores al 2 – 3 % en promedio.

tos que no cumplen con las condiciones de calidad para ser considerados (Sección 10.4). La introducción de esos puntos falsearía el ajuste. Igualmente, han sido descartados las regiones muestreadas lejanas a la tobera porque parecen estar afectadas por la cola asintótica de la onda de choque. No obstante, el número de puntos experimentales utilizados para realizar los ajustes es lo suficientemente grande como para que estos tengan buena calidad.

TABLA 11.3.– Parámetros de ajuste de la temperatura rotacional

Expansión	200 mbar	500 mbar	1000 mbar	2000 mbar
T_∞ (K)	13.000 ± 0.3	7.852 ± 0.03	5.642 ± 0.09	4.030 ± 0.016
C_1 (μm)	165.197 ± 1.6	187.589 ± 0.4	188.884 ± 0.9	199.020 ± 0.25
C_2 (μm)	90	140	90	113
r	0.9966	0.9995	0.9998	0.9999

La Tabla contiene los parámetros que proporcionan un buen ajuste a los datos experimentales de las 4 expansiones. Los parámetros están complementados con sus errores estadísticos (excepto para el parámetro C_2). Los errores están aproximados mientras que es conveniente dar los parámetros sin aproximar ya que una aproximación impediría reproducir la función temperatura rotacional según fue ajustada. El parámetro C_2 no presenta errores porque no ha sido incluido en el proceso de ajuste, siendo fijado al valor que da ajustes con menor χ^2 (ver texto). El coeficiente de correlación lineal pone en evidencia el aumento del ruido al disminuir la presión en precámara.

Los ajustes han sido realizados pesando los sumandos de la función χ^2 (Ec. 10.9) con los errores de las temperaturas rotacionales obtenidos de los *plots* de Boltzmann.

El ajuste ha sido realizado linealizando los puntos y la función tipo (Ec. 10.10):

$$\ln [T^* - T_r(\xi)] = \ln (T^* - T_\infty) - \frac{C_1}{(\xi + C_2)}. \quad (11.1)$$

El parámetro $-C_2$ debería representar la posición del origen de la expansión, ligeramente dentro de la tobera. El conjunto de puntos ajustado carece de información sobre la parte de la expansión más cercana a la tobera y, por lo tanto, este parámetro no proporciona información *verídica* sobre el origen de la expansión. Además, la Ec. 10.10 utilizada como función tipo del ajuste no representa bien la temperatura rotacional por debajo de los 300 μm . En consecuencia, $-C_2$ es físicamente poco importante y podría introducir incertidumbres innecesarias e injustificadas en los demás parámetros. Por otro lado, los errores estadísticos asociados a los parámetros en un ajuste no lineal tienen un significado complejo, al contrario que en los ajustes lineales en los parámetros donde se conoce perfectamente su significado.

Para obtener buenos ajustes basta con dotar al parámetro C_2 de un valor próximo al que generaríamos introduciéndolo en los ajustes pero no hacerlo partícipe del proceso de ajuste. Para obtener este valor hemos variado el parámetro C_2 entre -200 y 200 μm y hecho un ajuste lineal para cada valor adoptado por C_2 , optando por el conjunto de parámetros que haya producido el menor valor de χ^2 . Los valores de los parámetros obtenidos se pueden encontrar en la Tabla 11.3.

Los valores de la temperatura terminal calculados con los ajustes son compatibles entre sí y con lo esperado, siendo la más pequeña la correspondiente a la expansión más dura (2000 mbar). Las temperaturas terminales varían entre $\simeq 4$ y $\simeq 15.5$ K. Los valores adoptados por el parámetro C_1 también son compatibles con el crecimiento de la intensidad del gradiente de la temperatura rotacional esperado conforme aumenta la presión en precámara. Estos dos parámetros (T_∞ y C_1) están muy bien determinados, con errores relativos $\lesssim 2\%$ para ambos.

Como complemento al ajuste de la temperatura rotacional, es posible proponer la siguiente dependencia del parámetro T_∞ con respecto a la presión en precámara, p_0 :

$$T_\infty \simeq \frac{175}{\sqrt{p_0 - 18}}, \quad (11.2)$$

estando expresados T_∞ en K y p_0 en mbar y siendo la desviación típica de los residuos del ajuste $\simeq 0.1$ K. La dependencia de T_∞ con p_0 permite obtener información sobre la tempe-

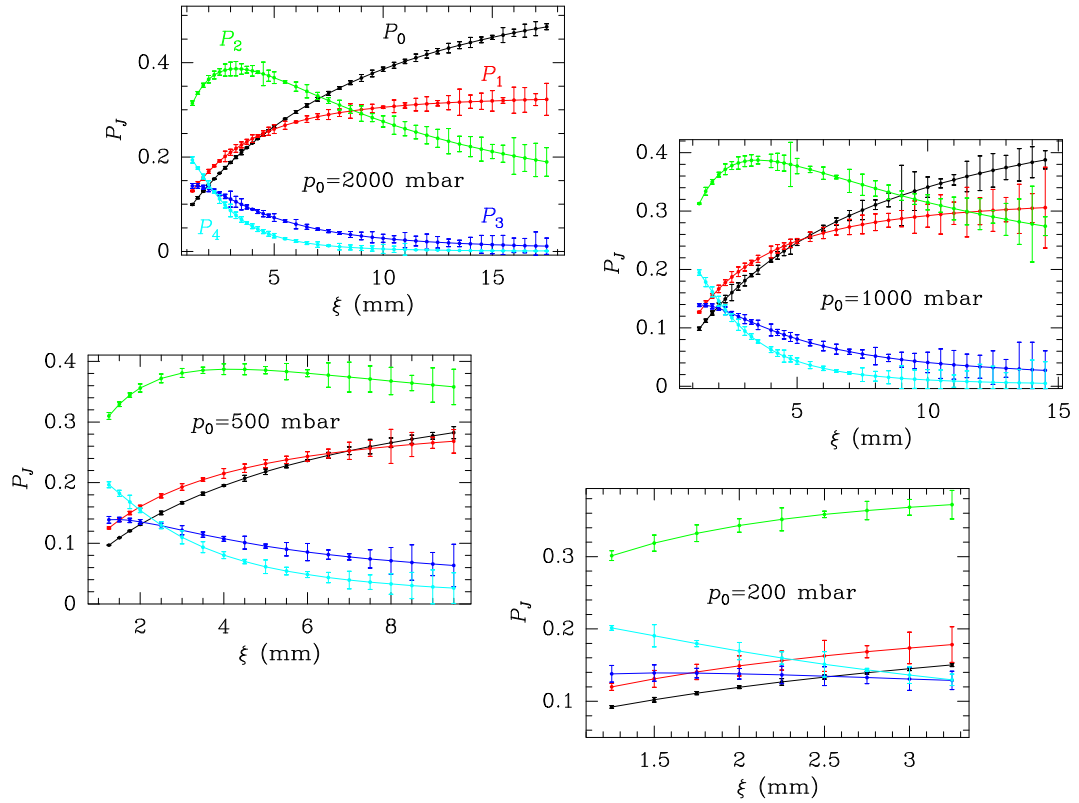


FIGURA 11.3.— Poblaciones P_0, \dots, P_4 a lo largo de las 4 expansiones con sus respectivos errores. Las poblaciones han sido calculadas utilizando su definición y utilizando la temperatura rotacional ajustada con los datos experimentales (*poblaciones teóricas*; ver Sección 10.3.3.3). Los errores de las poblaciones son el máximo del doble de los errores experimentales y el doble de la separación entre las poblaciones ajustadas y las experimentales.

ratura rotacional lejos de la tobera ($\xi \gg C_2$) para expansiones con presiones en precámara de entre 200 y 2000 mbar.

La evolución del parámetro C_1 con la presión en precámara no es suave, poniendo de manifiesto la complejidad de su interpretación.

Para llevar a cabo el resto de la investigación es conveniente utilizar la función temperatura ajustada y los errores calculados según el procedimiento expuesto en la Sección 10.3.3.2.

11.2.3. Poblaciones rotacionales

Una vez determinadas las temperaturas rotacionales se han calculado las poblaciones con la propia definición de éstas (Ec. 10.15; ver Figura 11.3). Los valores de las poblaciones cerca de la tobera son prácticamente iguales en las 4 expansiones. Las poblaciones de las expansiones a 1000 y 2000 mbar (presión grande) son bastante parecidas en toda la zona de silencio pero existe una diferencia apreciable entre éstas y las de 200 y 500 mbar (presión pequeña). En las expansiones a presiones pequeñas, y en especial en la de 200 mbar, las poblaciones tienden a un valor constante más rápidamente que en las expansiones a presiones grandes. En las expansiones a presiones pequeñas, $P_2 > P_0$ en toda la expansión mientras que en las expansiones a presiones grandes $P_0 > P_2$ únicamente cerca del disco de Mach. Por lo tanto el gas se enfría más cuando la presión en precámara es mayor.

Los errores se han determinado según el método expuesto en la Sección 10.3.3.3. Para tener una referencia global acerca de la calidad de las poblaciones obtenidas con la tempera-

tura rotacional, es conveniente calcular los errores relativos promedio para cada población y expansión. Para la expansión a 2000 mbar, los errores relativos de las poblaciones varían entre 1 y $\simeq 40\%$, siendo la población P_3 la de peor calidad. Los errores relativos de la mayor parte de las poblaciones de la expansión a 1000 mbar son muy parecidos a los de la de 2000 mbar. Sin embargo, el error relativo promedio de P_4 adopta valores extremadamente grandes con un $\simeq 123\%$. Este valor es esperable puesto que P_4 es próxima a cero en gran parte de la zona de silencio. Las expansiones a 500 y 200 mbar presentan errores relativos promediados significativamente menores, siendo de $2 - 25\%$ y $2 - 9\%$, respectivamente.

El promedio total de los errores relativos para cada expansión es de 17, 35, 10 y 6 % para las expansiones a 2000, 1000, 500 y 200 mbar. La determinación de un error relativo característico de todas las expansiones proporciona información acerca del método de intercambio de datos teóricos por experimentales en sí mismo. Este promedio global es de $\simeq 17\%$ (2σ) ó $\simeq 8\%$ (1σ).

TABLA 11.4.— Intensidades integradas de la rama Q

ξ (μm)	400 [−]	400 ⁺	15000
I_1 (cps)	71.2(0.7)	111.2(0.8)	3.1(0.3)
I_2 (cps)	64.8(0.8)	116.4(0.7)	3.08(0.23)
I_3 (cps)	65.5(0.8)	111.8(0.7)	2.5(0.3)
I_4 (cps)	64.6(0.7)	112.2(0.8)	3.10(0.24)
I_5 (cps)	63.8(0.8)		2.4(0.3)
I_6 (cps)			3.0(0.3)
I (cps)	66.0 ± 3.0	113.1 ± 2.4	3.0 ± 0.3

La Tabla muestra las intensidades integradas de las ramas Q para dos puntos distintos en la expansión a 2000 mbar. En los puntos de la expansión donde se cambie de condiciones de observación se debe tomar una serie de espectros antes y después del cambio para relacionar las densidades relativas en toda la expansión. Los superíndices $-$ y $+$ se refieren a los espectros I_i tomados *antes* y *después* del cambio de condiciones de observación. Los números entre paréntesis indican la desviación típica del ruido de cada espectro en $\text{cps}/\text{cm}^{-1}$. Las cantidades I son las intensidades integradas de la rama Q de los espectros promedio y sus errores la desviación típica de las intensidades integradas de la rama Q de cada uno de los espectros tomados individualmente.

11.3. Densidades relativa y absoluta

Las densidades relativas y absolutas se han hallado utilizando la rama Q del N_2 a 2331 cm^{-1} (ver Figura 11.4) según la metodología presentada en la Sección 10.3.3.

11.3.1. Densidad relativa

El registro de espectros en el mismo punto antes y después del cambio de condiciones es necesario para obtener el perfil de densidades (Sección 10.3.2.3). En el caso tomado como ejemplo de la densidad relativa a $400\text{ }\mu\text{m}$ de la boca de tobera en la expansión a 2000 mbar (ver Tabla 11.4) la relación de intensidades antes y después del cambio de condiciones de observación es $I(400^-)/I(400^+) = 113.1/66.0$. La multiplicación por el factor anterior de todas las intensidades integradas relativas a los puntos que cumplen que $400\text{ }\mu\text{m} \leq \xi \leq 600\text{ }\mu\text{m}$, proporciona un perfil de la densidad *coherente* entre 200 y $600\text{ }\mu\text{m}$ salvo por un factor de escala global. La aplicación de este método a toda la expansión permite obtener la función densidad completa no escalada globalmente.

En este proceso se ha considerado que los factores de escala mencionados no tienen error. Se ha elegido la incertidumbre de cada uno de los puntos de empalme como el mayor

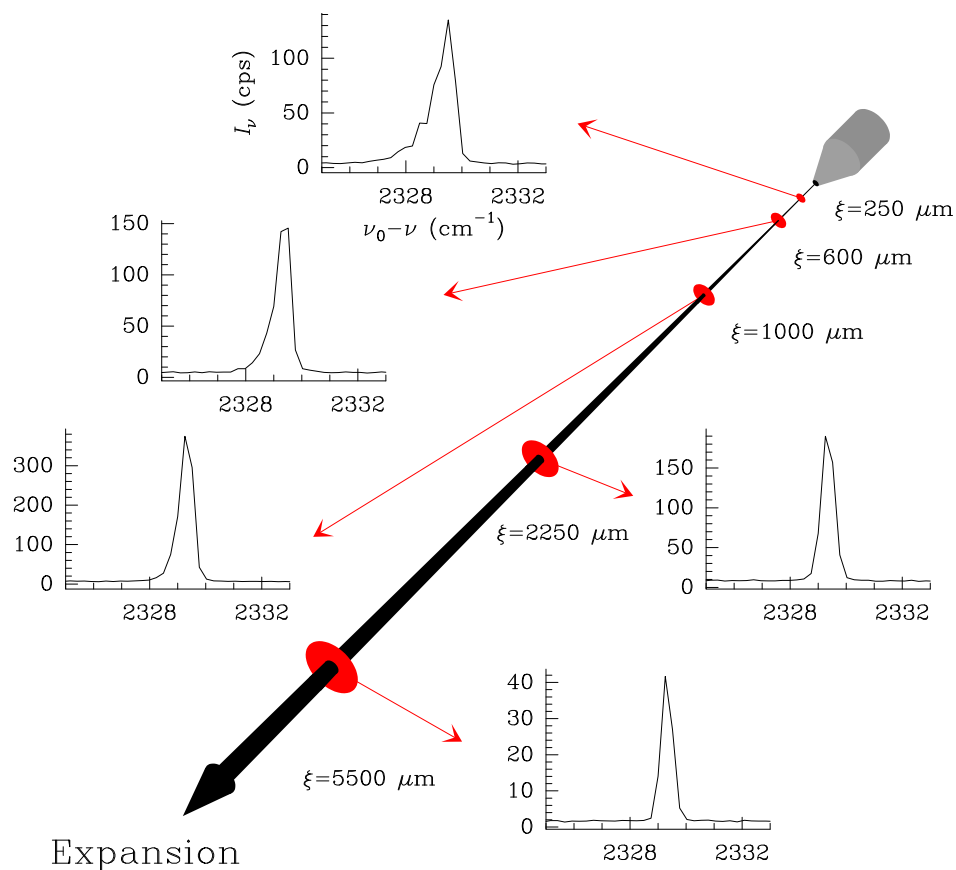


FIGURA 11.4.— Espectros rovibracionales la rama $Q \ v = 1 \leftarrow 0$ registrados en la expansión de 2000 mbar. La Figura muestra los espectros promediados de la rama Q en 5 puntos distintos de la expansión. El eje de las abscisas representa la frecuencia del espectro rovibracional mientras que el de las ordenadas representa la intensidad registrada expresada en cps. Las escalas de los espectros en los ejes de las ordenadas no coinciden entre sí ya que las condiciones de observación son distintas para todos ellos (ver Apéndice D). La secuencia de espectros permite visualizar la forma de la rama Q a lo largo de la expansión. Estos espectros no están escalados unos con respecto a otros y no es posible observar el decaimiento de la densidad (proporcional a la intensidad integrada de la rama) con la distancia a la boca de tobera. La modificación en la forma sufrida por la rama Q procede de la variación de la temperatura rotacional con la distancia.

de los errores estimados con cada una de las condiciones de observación, habiendo sido los errores correspondientes también escalados.

11.3.2. Densidad absoluta

La forma de reducir los datos para hallar la densidad absoluta es distinta que para la relativa (Sección 10.3.3.5). Posteriormente a la integración de las ramas Q de los espectros individuales y promedio en cada punto de la expansión, se deben comparar estas intensidades con las de las ramas Q del N_2 en estático a una presión conocida. Esta comparación permite hallar la constante K de la Ec. 10.23.

TABLA 11.5.— Densidad absoluta: intensidades de la rama Q

	Expansión					
	Serie 1	σ_1 (cps)	Serie 2	σ_2 (cps)	Serie 3	σ_3 (cps)
I_0 (cps)	44.43	0.7483	42.32	0.8759	42.97	0.6971
I_1 (cps)	42.54		44.18		42.46	
I_2 (cps)	43.47		43.07		43.84	
I_3 (cps)	44.07		42.42		44.00	
I_4 (cps)	44.12		44.04		43.98	
$\langle\sigma_S\rangle$ (cps)	0.7738					
I_{prom} (cps)	43.73		43.20		43.45	
σ_{prom} (cps)	0.2608					
I (cps)	43.5 ± 0.8					
	Estático					
	Serie 1	σ_1 (cps)	Serie 2	σ_2 (cps)	Serie 3	σ_3 (cps)
I_0 (cps)	331.9	3.712	333.2	3.311	333.3	3.455
I_1 (cps)	340.0		341.2		332.9	
I_2 (cps)	330.5		339.8		336.5	
I_3 (cps)	335.4		339.7		330.2	
I_4 (cps)	335.9		341.2		339.1	
$\langle\sigma_S\rangle$ (cps)	3.439					
I_{prom} (cps)	334.7		339.0		334.4	
σ_{prom} (cps)	2.566					
I (cps)	336 ± 4					

Ejemplo del proceso de obtención de las intensidades de la rama Q en expansión y en estático en el punto a $900 \mu\text{m}$ de la boca de tobera en la expansión a 200 mbar. Suponiendo las series registradas en expansión, para cada una de las 3 se hallan las intensidades integradas de las ramas Q de los espectros individuales y del promedio (I_i e I_{prom}), y la desviación típica de la distribución de intensidades individuales (σ_i) para cada serie. Posteriormente, se obtiene el valor medio de las desviaciones típicas de las 3 series ($\langle\sigma_S\rangle$) y la desviación típica del conjunto de las I_{prom} (σ_{prom}). Se halla la media de las intensidades integradas de la rama Q de los espectros promedio (I), obteniéndose la intensidad integrada representativa del punto observado, y la desviación típica final (σ) mediante la expresión $\sigma = \sqrt{\sigma_{\text{prom}}^2 + \langle\sigma_S\rangle^2}$. Finalmente se repite el proceso con los espectros registrados con el gas en estático. Generalmente, los errores relativos de la intensidad I son $\simeq 1 - 2\%$.

En cada punto de la expansión, se han registrado 3 series de espectros en expansión intercalando otras 3 series de espectros en estático. En la Tabla 11.5 se puede ver una muestra de los resultados. Los errores relativos de las intensidades suelen ser menores al 5 %, tomando en muchos casos valores del 1 – 2 %. Teniendo en cuenta que los errores relativos de la temperatura y de la presión en estático son menores del 0.5 y 2 %, siendo comunes valores $\leq 0.1\%$, los errores relativos de la densidad absoluta son siempre menores del 20 % y

TABLA 11.6.– Densidades absolutas de las 4 expansiones

ξ (μm)	Expansión 200 mbar		Expansión 500 mbar	
	n (m^{-3})	$\Delta n/n$ (%)	n (m^{-3})	$\Delta n/n$ (%)
300	$(3.1 \pm 0.3) \times 10^{23}$	9.7	$(8.05 \pm 0.14) \times 10^{23}$	1.7
900	$(4.82 \pm 0.12) \times 10^{22}$	2.5	$(1.2 \pm 0.03) \times 10^{23}$	2.5
1800	$(1.25 \pm 0.03) \times 10^{22}$	2.4		
3000	$(4.4 \pm 0.3) \times 10^{21}$	6.8	$(1.19 \pm 0.03) \times 10^{22}$	2.5
6000			$(3.01 \pm 0.19) \times 10^{21}$	6.3
9000			$(1.55 \pm 0.06) \times 10^{21}$	3.9

ξ (μm)	Expansión 1000 mbar		Expansión 2000 mbar	
	n (m^{-3})	$\Delta n/n$ (%)	n (m^{-3})	$\Delta n/n$ (%)
300	$(1.64 \pm 0.13) \times 10^{24}$	7.9	$(3.2 \pm 0.4) \times 10^{24}$	12.5
900	$(2.42 \pm 0.07) \times 10^{23}$	2.9	$(4.99 \pm 0.10) \times 10^{23}$	2.0
3000	$(2.35 \pm 0.09) \times 10^{22}$	3.8	$(4.67 \pm 0.18) \times 10^{22}$	3.8
6000	$(5.8 \pm 0.7) \times 10^{21}$	12.0	$(1.15 \pm 0.05) \times 10^{22}$	4.3
9000	$(2.4 \pm 0.3) \times 10^{21}$	12.5	$(5.0 \pm 0.5) \times 10^{21}$	10.0
12000	$(1.5 \pm 0.3) \times 10^{21}$	20.0	$(2.8 \pm 0.4) \times 10^{21}$	14.3
15000	$(9.6 \pm 1.8) \times 10^{20}$	18.8	$(1.8 \pm 0.5) \times 10^{21}$	27.8
18000	$(6.9 \pm 1.3) \times 10^{20}$	18.8	$(1.20 \pm 0.20) \times 10^{21}$	16.7

Densidades absolutas obtenidas de los datos experimentales en varios puntos de las 4 expansiones. La expansión con la densidad mayor cerca de la tobera es la de 2000 mbar. Las 4 expansiones se comportan de forma similar cerca de la tobera, cumpliéndose que el cociente de las densidades de dos expansiones es aproximadamente constante e igual a la razón de presiones en precámara. No obstante, a distancias de la tobera grandes no parece cumplirse dicha relación. Los errores relativos se mantienen generalmente por debajo del 20 %, alcanzándose este valor en los puntos más alejados de la tobera. En la expansión a 2000 mbar existe un punto a 15000 μm cuyo error relativo es $\simeq 30$ % y que parece proceder de un problema con el manorreductor utilizado para fijar la presión en precámara. A pesar de ello, la utilización de este error no afecta a los resultados significativamente.

TABLA 11.7.– Factores de escala de la densidad absoluta

Expansión	200 mbar	500 mbar	1000 mbar	2000 mbar
F	9.71634×10^{23}	2.61973×10^{24}	6.31092×10^{24}	1.31463×10^{25}
$ n_{\text{abs}}^{\text{esc}} - n_{\text{abs}}^{\text{exp}} / n_{\text{abs}}^{\text{exp}}$ (%)	7.1	9.0	3.6	4.3

Se consideran los factores sin error pues es preferible estimarlo en la función densidad absoluta. En la tercera fila se incluyen las desviaciones relativas promedio de las densidades relativas escaladas ($n_{\text{abs}}^{\text{esc}}$) con respecto a las absolutas experimentales ($n_{\text{abs}}^{\text{exp}}$).

con valores comúnmente ~ 10 %. Existe un único caso en el que el error relativo es $\simeq 30$ %, siendo achacable a un error en el experimento (ver Tabla 11.6).

Utilizando las densidades absolutas y siguiendo las directrices especificadas en la Sección 10.3.3.6, se obtienen los factores de escala para la función densidad relativa que se muestran en la Tabla 11.7. Estos factores permiten escalar las funciones densidad relativa para obtener las funciones densidad absoluta a lo largo de la expansión. En la Figura 11.5 se muestran las nubes de puntos de las densidades absoluta experimental y relativa escalada, y su ajuste a partir de 1250 μm .

El acuerdo entre los datos experimentales de la densidad absoluta y los de la densidad relativa escalados es muy bueno en todas las expansiones (ver Tabla 11.7), aunque empeora para presiones en precámara pequeñas. En especial, en la expansión a $p_0 = 200$ mbar,

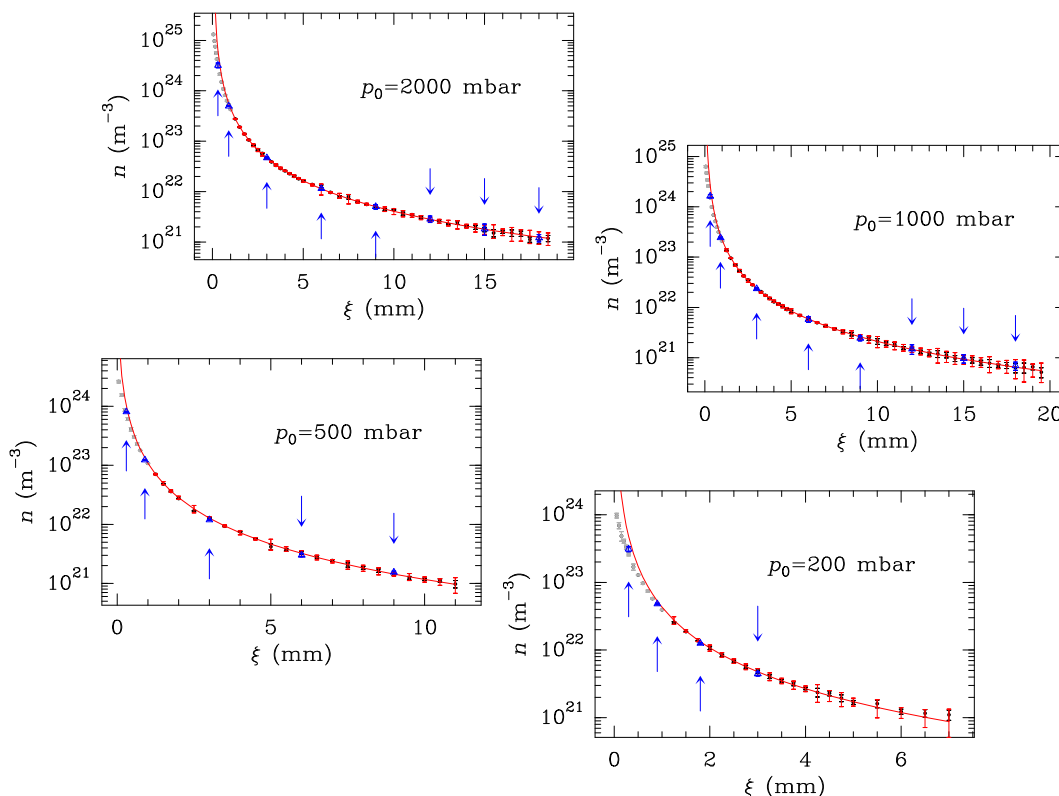


FIGURA 11.5.— Densidades absolutas de las 4 expansiones. En cada una de las gráficas se han representado (i) las densidades relativas escaladas (Sección 10.3.3.6) junto con sus errores (negro y gris), (ii) las densidades absolutas experimentales junto con sus errores (azul), y (iii) el ajuste de los puntos con $\xi \geq 1250 \mu\text{m}$ (Ec. 10.28; curva continua roja) junto con los errores estimados para los puntos ajustados. Los puntos negros han sido utilizados para realizar el ajuste; los puntos grises han sido excluidos por cumplir que $\xi \leq 1250 \mu\text{m}$. Los puntos azules correspondientes a las densidades absolutas experimentales han sido señalados con flechas azules para facilitar su observación. Nótese el buen acuerdo entre los puntos de las densidades relativa escalada y absoluta experimental.

cerca de la tobera la densidad absoluta es mayor que la correspondiente relativa escalada y lejos de la tobera es menor. Esto indica que la expansión estudiada en la sesión de las densidades absolutas no es la misma que la de la sesión de las densidades relativas, no encontrándose este comportamiento en las otras expansiones. Este efecto está producido probablemente por la insuficiente capacidad de regulación del manoreductor utilizado a presiones pequeñas.

Teniendo en cuenta que los errores relativos de la densidad absoluta son en la mayor parte de los casos similares o menores que los errores relativos de la densidad relativa, una buena estimación de los errores absolutos de la densidad relativa escalada procede de la suposición de que sus errores relativos son los mismos que los de la densidad relativa. En adelante llamaremos *densidades absolutas* a las *densidades relativas escaladas*.

El método de ajuste utilizado ha sido el mismo que para la temperatura rotacional: variando el parámetro C_4 entre -200 y $200 \mu\text{m}$ y considerándolo como fijo para cada uno de sus valores, hemos podido realizar un ajuste lineal previa linealización de los datos experimentales. El parámetro C_4 no tiene mucho significado físico, siendo en este caso mucho más patente al tomar valores positivos o negativos dependiendo de la expansión ajustada. Los parámetros obtenidos de los ajustes se pueden encontrar en la Tabla 11.8.

TABLA 11.8.— Parámetros de los ajustes de las densidades

Expansión	200 mbar	500 mbar	1000 mbar	2000 mbar
$C_3 (\times 10^{28} \text{ m}^{-3} \mu\text{m}^2)$	4.3 ± 0.026	11.8 ± 0.05	21.0 ± 0.08	40.2 ± 0.14
$C_4 (\mu\text{m})$	0	40	-20	-50
r	0.9988	0.9996	0.9998	0.9995

En este caso, al contrario de con las temperaturas rotacionales (Tabla 11.3), tanto los errores como los parámetros han sido aproximados pues en este caso la aproximación no degrada de manera importante la reproducibilidad de las funciones ajustadas. Los valores de la constante C_4 han sido fijados como en el caso de la temperatura rotacional. El hecho de que los valores del parámetro C_4 cambien de signo no es físicamente representativo (ver texto). El coeficiente de correlación lineal indica que todos los ajustes son buenos pero en la expansión los datos son más ruidosos debido al efecto de la anchura del disco de Mach (ver Figura 11.5).

Los errores de las densidades también han sido elegidos como el máximo del doble del error experimental y el doble de la separación entre las densidades experimentales y las ajustadas.

Es útil obtener el promedio de los errores relativos, como se hizo con las poblaciones, siendo del 12, 15, 10 y 16 % para las expansiones a 2000, 1000, 500 y 200 mbar, respectivamente. Con estos números, el valor del error relativo global es de $\simeq 13\%$ (2σ) ó $\simeq 6\%$ (1σ).

Es posible dar una expresión analítica del parámetro C_3 en función de p_0 :

$$C_3 \simeq \left[-75.9 + \sqrt{5664 + 3.9p_0} \right] \times 10^{28}, \quad (11.3)$$

con p_0 expresada en mbar y C_3 en $\text{m}^{-3} \mu\text{m}^2$. La desviación típica de la separación entre los valores de C_3 obtenidos de los ajustes de las densidades y los generados a través de la expresión anterior es $\simeq 1 - 10\%$ del valor de C_3 . Esta incertidumbre es lo suficientemente pequeña como para proporcionar el comportamiento aproximado de la densidad lejos de la tobera para cualquier expansión con una presión en precámara entre 200 y 2000 mbar.

11.4. Otras magnitudes derivadas

La determinación de las expresiones analíticas de la temperatura rotacional y la densidad permite trabajar con funciones suaves que contienen la mayor parte de la información física relevante. En adelante se han utilizado únicamente las funciones ajustadas para calcular el resto de las magnitudes necesarias en la estimación de las tasas de transferencia colisional.

11.4.1. Temperatura traslacional y rotura de equilibrio

La temperatura traslacional ha sido calculada con la Ec. 10.29:

$$T_t(\xi) \simeq T_0 \left[\frac{T_0}{n_0} \frac{n(\xi)}{T_r(\xi)} \right]^{2/3}, \quad \xi \geq 1250 \mu\text{m} \quad (11.4)$$

donde T_0 y n_0 son la temperatura y la densidad del gas en precámara. La Figura 11.6 muestra las temperaturas rotacional y traslacional, además del parámetro rotura de equilibrio ($X = \beta B[T_t^{-1} - T_r^{-1}]$). Los errores de T_t han sido calculados mediante el método de propagación.

Las diferencias de temperatura máximas en cada expansión varían entre 3.5 K en la de 2000 mbar y 11 K en la de 200 mbar. El parámetro rotura de equilibrio en un punto de la

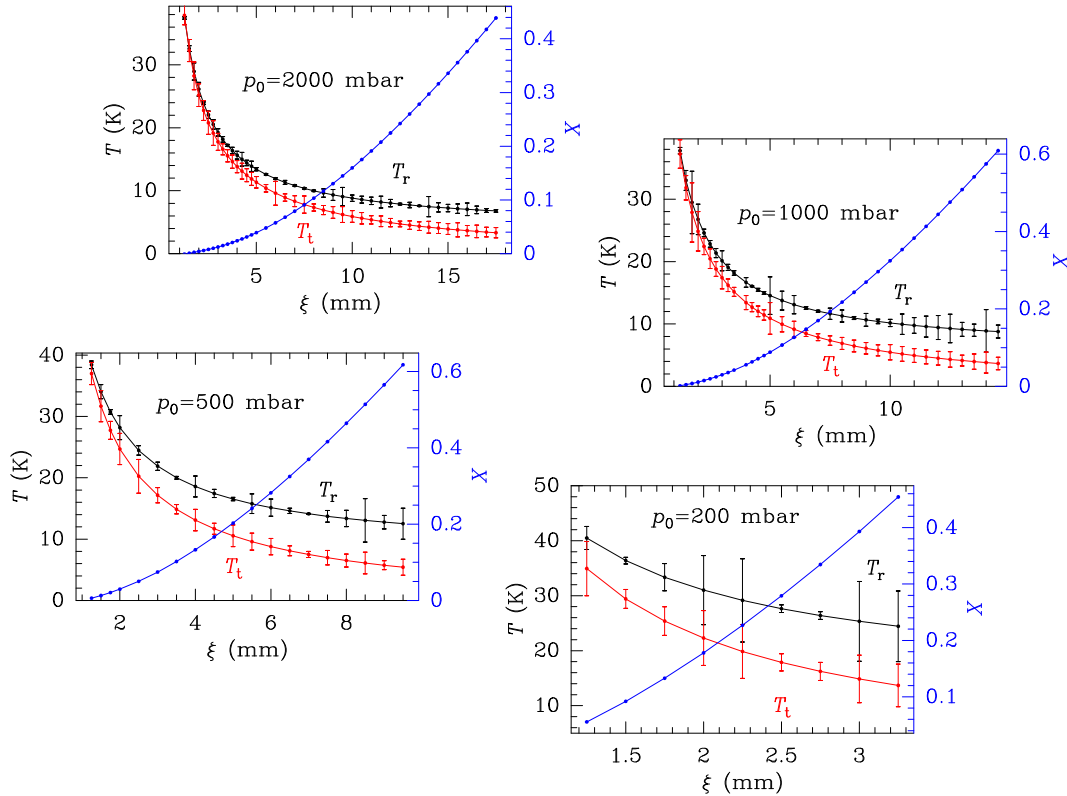


FIGURA 11.6.— Temperatura traslacional, T_t , y rotura de equilibrio, X , de las 4 expansiones. En cada una de las 4 gráficas se han representado las temperaturas rotacional (negro) y traslacional (rojo), y el parámetro rotura de equilibrio (azul). Los errores de la temperatura rotacional han sido estimados según lo expuesto en la Sección 10.3.3.2 (ver Sección 11.2.2). Los de la temperatura traslacional han sido calculados con el método de propagación (ver Sección 10.3.3.7).

expansión depende de la presión en precámara, p_0 , aumentando conforme ésta disminuye. Además, p_0 también determina el crecimiento de X en función de la distancia a la boca de tobera en una expansión dada, siendo mayor cuanto menor es la presión en precámara. Por otro lado, es conveniente señalar que el parámetro X de la expansión a 200 mbar es el único cuyo valor a $1250 \mu\text{m}$ es significativamente mayor que cero, lo cual tiene implicaciones importantes (Sección 11.5.1).

11.4.2. Velocidad de expansión

Con las temperaturas rotacionales y traslacionales es posible calcular la velocidad de expansión del gas (Ec. 10.30). Los resultados están representados en la Figura 11.7. Las velocidades de expansión del gas son prácticamente iguales en todas las expansiones decreciendo ligeramente al disminuir la presión en precámara. La velocidad del gas a $1250 \mu\text{m}$ de la boca de tobera es $\simeq 720 \text{ m s}^{-1}$ aumentando en $40 - 60 \text{ m s}^{-1}$ durante la expansión hasta alcanzar una velocidad terminal de $740 - 750 \text{ m s}^{-1}$. Los errores de las velocidades se estiman mejores del 1 % para todas las expansiones.

Al estar la boca de tobera muy próxima a la superficie sónica ($M \simeq 1$), $v_{\text{exp}}(\xi = 0) \simeq 300 \text{ m s}^{-1}$. En consecuencia, entre la boca de tobera y $1250 \mu\text{m}$ el gas adquiere aceleraciones $\simeq 7 \times 10^7 \text{ m s}^{-2}$, aumentando su velocidad en $\simeq 420 \text{ m s}^{-1}$. Para la expansión a 2000 mbar el tiempo de vuelo de un volumen de gas expandido entre el origen de la expansión y el centro del disco de Mach es $\simeq (3.23 \pm 0.03) \times 10^{-5} \text{ s}$.

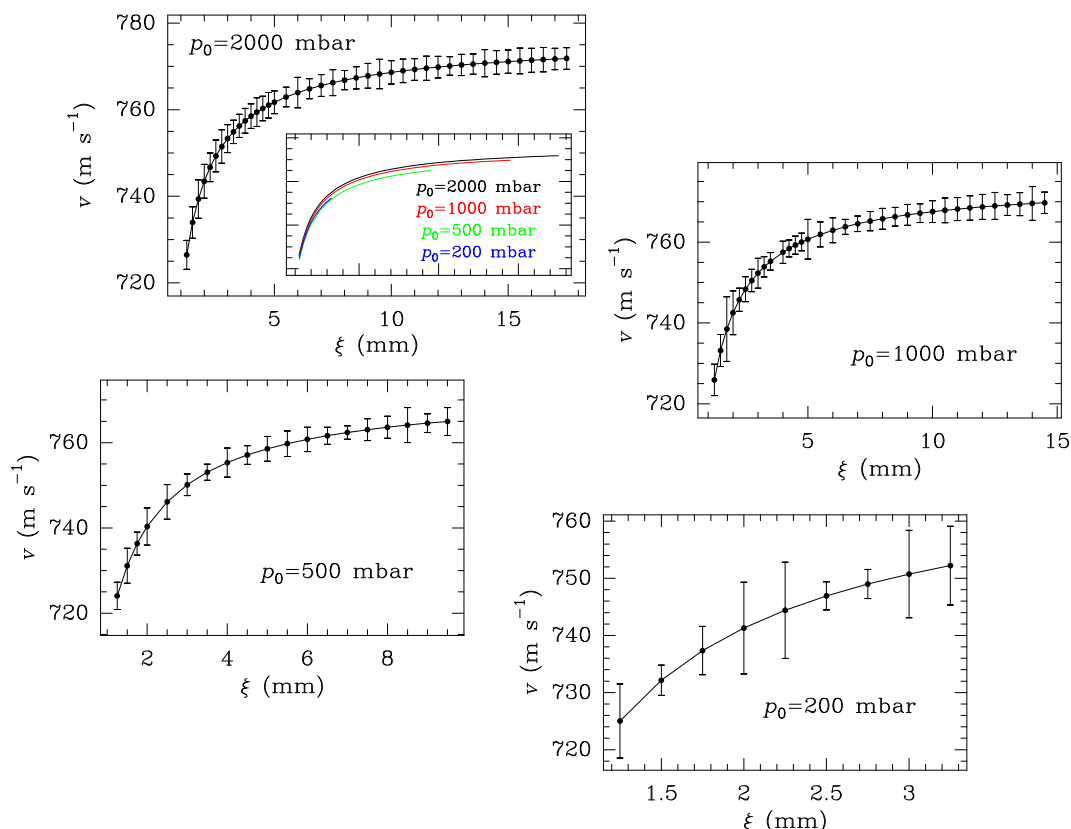


FIGURA 11.7.— Velocidades de expansión del gas en las 4 expansiones. En las gráficas se muestran las velocidades de expansión en todos los puntos muestreados junto con sus respectivos errores. Las velocidades se han obtenido utilizando las temperaturas rotacional y traslacional según indica la Ec. 10.30. Los errores se han calculado con el método de propagación. Las velocidades de expansión son muy parecidas para todas las expansiones, variando bastante poco en la mayor parte del recorrido del gas. Por ejemplo, en la expansión de 2000 mbar la velocidad varía entre 1250 y 17500 μm en $\simeq 6\%$. En la gráfica de la expansión de 2000 mbar se ha añadido un cuadro con la representación conjunta de las velocidades de expansión de las 4 expansiones para permitir comparaciones. Las magnitudes representadas y los intervalos en el eje de las abscisas y el de las ordenadas son los mismos que los utilizados para representar las velocidades de expansión de la expansión de 2000 mbar.

11.4.3. Las derivadas temporales de las poblaciones

Las derivadas espaciales se pueden calcular a partir de la temperatura rotacional (Ec. 10.21) y sus errores utilizando la Ec. 10.22.

El cálculo de las derivadas temporales de las poblaciones rotacionales requiere tan sólo multiplicar las derivadas espaciales por la velocidad de expansión (Sección 10.3.3.3). Debido a que la velocidad de expansión viene dada por una función muy plana, la forma funcional de las derivadas temporales es muy parecida a la de las espaciales en el intervalo de distancias estudiado (ver Figura 11.8). Los errores de las derivadas temporales son fácilmente calculables con el método de propagación de errores, resultando ser muy parecidos a los de las derivadas espaciales.

Sin embargo, en ambas derivadas los errores relativos pueden llegar a ser muy grandes a causa de que hay muchos puntos con valores cercanos a cero. Por ello es conveniente utilizar un error relativo global para cada población, $\hat{\epsilon}_J$, para dar información acerca de la

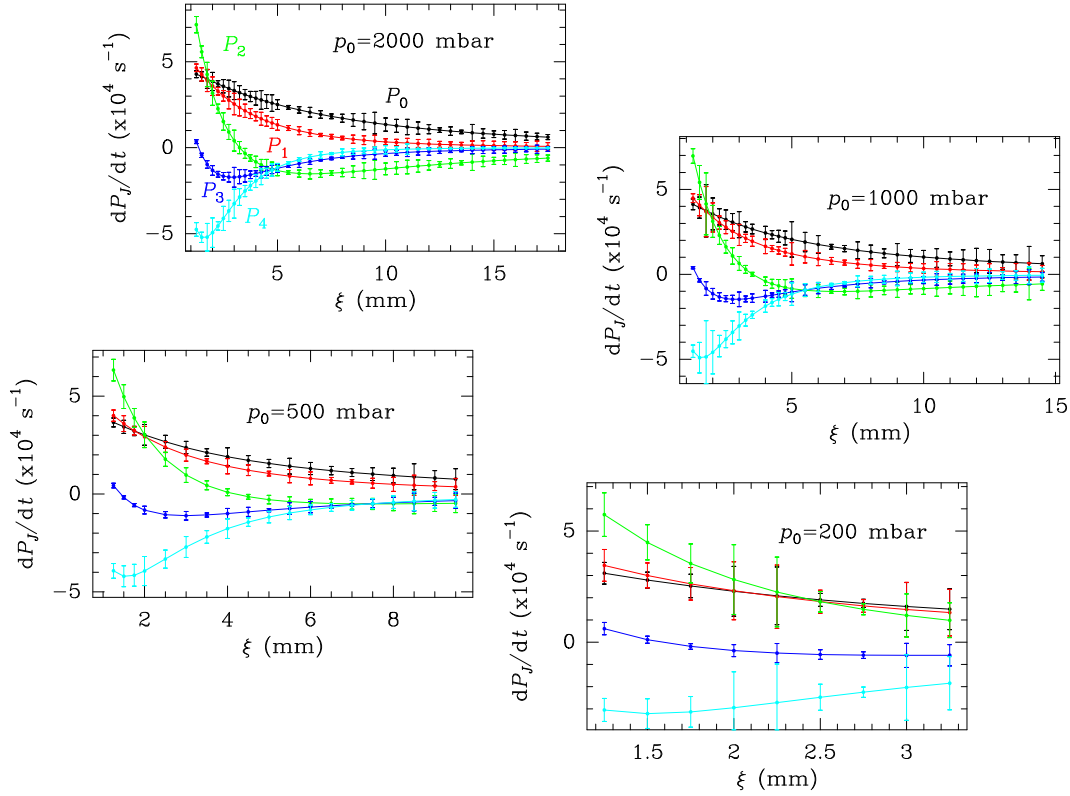


FIGURA 11.8.— Derivadas temporales de las poblaciones para las 4 expansiones. Han sido calculadas según el método expuesto en la Sección 10.3.3.3. Los errores han sido calculados con el método de propagación. En todas las expansiones los errores son pequeños excepto en la expansión a 200 mbar, que presenta una mayor incertidumbre por la menor precisión de los datos experimentales.

precisión de los datos. Este error se puede definir como

$$\hat{\varepsilon}_J = \frac{\sum_{i=1}^n \Delta [dP_J/dt(\xi_i)]}{\sum_{i=1}^n |dP_J/dt(\xi_i)|}, \quad (11.5)$$

donde $dP_J/dt(\xi_i)$ es la derivada temporal de la población P_J en el punto ξ_i y $\Delta [dP_J/dt(\xi_i)]$ su error absoluto. Estos errores relativos son menores del 30 % para todas las poblaciones de las expansiones a 2000 y 500 mbar, aumentando hasta el 35 % en la expansión a 1000 mbar y al 40 % a 200 mbar. En esta última expansión el mayor error corresponde a la derivada de la población P_3 con un 65 % y es debido a que esta derivada es mucho menor que las del resto de las poblaciones. Eliminando la derivada del nivel $J = 3$ en la expansión a 200 mbar, las derivadas temporales de las poblaciones tienen un error global menor del 30 % (2σ) y del 10 – 15 % (1σ).

11.5. Tasas de transferencia colisional y secciones eficaces de colisión

Para la estimación de las tasas de transferencia (Sección 10.3.3.9) se ha utilizado un conjunto de valores calculados por F. Thibault especialmente para este estudio (Fonfría et al., 2007), en el que se consideró la superficie de energía potencial (PES) de van der Avoird modificada para el N_2 (vdA-PES; van der Avoird et al., 1986; Cappelletti et al., 1998). Los cálculos fueron realizados con el código MOLSCAT (Hutson & Green, 1994), con el que se simuló las colisiones del N_2 con el método *close coupling* (CC; p.e. Bernstein, 1979). Este

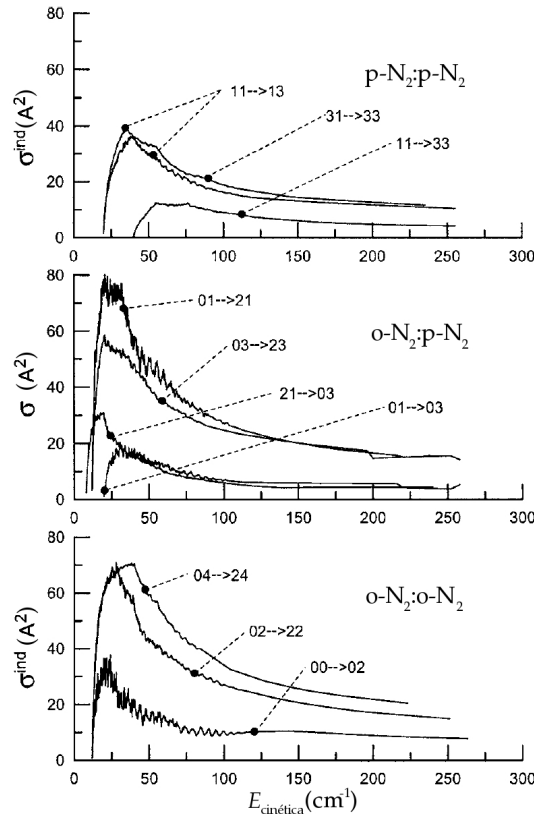


FIGURA 11.9.— Secciones eficaces de colisión del N_2 . En la Figura se muestran varios ejemplos de las 148 secciones eficaces de colisión calculadas mediante el método *close coupling* (ver el texto para más detalles; Figura tomada de Fonfría et al., 2007).

método es *exacto*, estando la precisión de sus resultados limitada únicamente por la cantidad de autoestados utilizados en la base considerada. Se consideraron tanto el o- N_2 como el p- N_2 . Los niveles rotacionales involucrados en los cálculos fueron $J = \{i, j, l, m\} \leq 7$, siendo la energía del proceso $|i(i+1) + j(j+1) - l(l+1) - m(m+1)| \leq 70$ expresada en unidades de la constante rotacional B . En las colisiones o- N_2 :o- N_2 y p- N_2 :p- N_2 las moléculas fueron consideradas como indistinguibles y en las o- N_2 :p- N_2 , distinguibles. Se obtuvieron 148 secciones eficaces de colisión distintas que posteriormente fueron utilizadas para calcular el mismo número de tasas de transferencia, $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ (ver Figura 11.9 y Tabla B.1).

Los cálculos fueron realizados con un ordenador IBM Power 4 Station. En los cálculos de las colisiones orto-orto y para-para se invirtieron 4 h de tiempo de CPU por sección eficaz mientras que para las colisiones orto-para se necesitaron 360 h por sección eficaz. La gran cantidad de tiempo de cálculo requerido limitó el número de secciones eficaces calculadas, impidiendo el posterior tratamiento del gas a temperaturas traslacionales mayores a 35 K.

11.5.1. Las tasas de transferencia calculadas y los datos experimentales

Todos los cálculos realizados a partir de ahora junto con el programa MEQNEW fueron desarrollados primero por S. Montero y repetidos posterior e independientemente de forma completa por el autor de esta Tesis. Los resultados a los que se han llegado son totalmente compatibles y sólo hay pequeñas diferencias de origen numérico.

El programa MEQNEW (Sección 10.3.3.10) ha proporcionado cada una de las contribuciones a la derivada temporal de la población i -ésima asociadas a cada proceso colisional, es decir, cada sumando $a_{\mu\nu\rho\sigma} k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down}}$ de la Ec. 10.36.

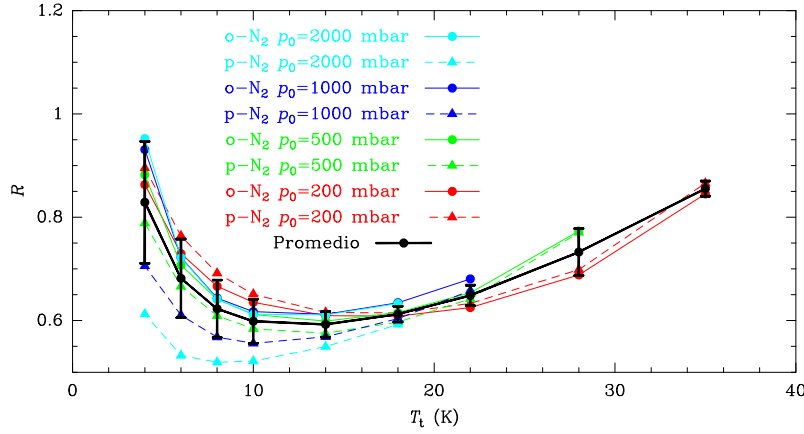


FIGURA 11.10.— Factor de escala de las tasas de transferencia en función de T_t . En la Figura se muestran los factores de escala a diversas temperaturas traslacionales (4, 6, 8, 10, 14, 18, 22, 28 y 35 K) para cada una de las expansiones y diferenciando entre el o- N_2 ($J = 0$) y el p- N_2 ($J = 1$). Los datos de la expansión a 2000 mbar están representados en cian, los de la expansión a 1000 mbar en azul, en verde para la de 500 mbar y en rojo para la de 200 mbar. Los datos relativos al o- N_2 son círculos conectados por líneas continuas mientras que los relativos al p- N_2 son triángulos conectados por líneas discontinuas. En negro con círculos unidos por líneas gruesas están representados los promedios de los factores de escala a cada temperatura traslacional acompañados por la desviación típica de la distribución de puntos. En los promedios a temperaturas traslacionales de entre 4 y 18 K se han utilizado todos los puntos de las 4 expansiones mientras que en el promedio a 22 y 28 K se han descartado la expansión a 2000 mbar y las expansiones a 1000 y 2000 mbar, respectivamente. A $T_t = 35$ K únicamente se ha utilizado la expansión a 200 mbar (ver texto).

La utilización de los datos experimentales obtenidos, la RMEQ (Ec. 10.36) y las tasas calculadas numéricamente han permitido estimar la calidad de éstas y corregirlas con los factores de escala $R_i = (\text{LHT})_i / (\text{RHT})_i$ (ver Sección 10.3.3.9), donde LHT_i y RHT_i son los miembros de la izquierda y la derecha de la RMEQ para el punto i -ésimo, respectivamente. El miembro de la izquierda es completamente experimental y el de la derecha se ha calculado con las poblaciones y la densidad experimentales, y las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$. Si $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ fueran exactamente iguales a las tasas de transferencia reales, $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down}}$, los factores de escala serían iguales a la unidad a cualquier temperatura. En consecuencia, cualquier desviación de estos con respecto a la unidad indica desviaciones de las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ con respecto a $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down}}$.

Las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ han sido calculadas a $T_t = 2, 4, 6, 8, 10, 14, 18, 22, 28, 40$ y 50 K, aunque el conjunto no es completo a 40 y 50 K. Considerando que las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ no disponibles a estas temperaturas deben ser $\sim 10^{-17} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, algunos de los sumandos de la RMEQ faltantes pueden ser $\sim 10\%$ de las derivadas temporales de las poblaciones. Por lo tanto, es probable que los resultados asociados a temperaturas traslacionales por encima de los 35 K estén afectados sustancialmente por estas carencias, haciéndolos inútiles. En consecuencia, la T_t máxima utilizada ha sido de 35 K y las tasas calculadas mediante interpolación lineal.

Los factores de escala han sido representados en la Figura 11.10. Para cada expansión se han representado dos nubes de puntos distintas que corresponden a los valores de los factores de escala calculados para los niveles fundamentales del o- N_2 ($J = 0$) y del p- N_2 ($J = 1$) a $T_t = 4, 6, 8, 10, 14, 18, 22, 28$ y 35 K.

Cuando T_t es pequeña, los factores de escala se comportan del siguiente modo:

1. Las nubes de puntos del o- N_2 y del p- N_2 de una misma expansión se separan conforme la temperatura traslacional disminuye, siendo máxima esta separación en la

expansión a 2000 mbar y mínima en la expansión a 200 mbar (ver Figura 11.10).

2. Los factores de escala del p-N₂ disminuyen con p_0 a una misma temperatura.
3. Los factores de escala asociados al p-N₂ son menores que los del o-N₂ en todas las expansiones.
4. La dependencia de los factores de escala con T_t por debajo de 20 K para todas las expansiones y ambas especies (orto y para) presenta una gran curvatura.
5. Los factores de escala asociados del o-N₂ parecen ser muy similares por debajo de 20 K para todas las expansiones. No ocurre así con los del p-N₂, siendo distintos a una misma T_t para las 4 expansiones, principalmente cuando $T_t < 10$ K.

A partir de estos hechos es posible obtener ciertas conclusiones:

- El grado de separación entre los factores de escala para las especies orto y para aumenta con p_0 , por lo que depende de la temperatura rotacional alcanzada durante cada expansión (Ec. 11.2; $T_r(T_t = 4 \text{ K}, p_0 = 2000 \text{ mbar}) = 7.31 \text{ K}$, $T_r(T_t = 4 \text{ K}, p_0 = 200 \text{ mbar}) = 16.92 \text{ K}$). Por lo tanto, las divergencias detectadas entre los factores de escala de ambas especies se pueden interpretar como una dependencia errónea de la vdA-PES con la simetría de las moléculas en colisión (puntos 1 y 2).
- La dependencia con T_t de las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ más importantes para ambas especies (orto y para) es distinta a las de las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down}}$, siendo mejor para el o-N₂ que para el p-N₂ (punto 3).
- La calidad de los valores adoptados por las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ con T_t aumenta conforme ésta disminuye (punto 4).
- Los menores factores de escala se encuentran entre 8 y 22 K, aproximadamente. Esto supone una sobrestimación de las secciones eficaces de colisión a las energías correspondientes a esas temperaturas traslacionales.

Por otro lado, cuando $T_t \gtrsim 20$ K, los factores de escala se comportan del siguiente modo:

6. Las diferencias entre los correspondientes al p-N₂ y al o-N₂ no son significativas para una expansión dada.
7. Tienden a aumentar bruscamente con T_t , siendo el ritmo de crecimiento mayor cuanto más grande es la presión en precámara.

Las conclusiones obtenidas de estos comportamientos son:

- El punto 6 posiblemente esté relacionado con la adición de más sumandos en la RMEQ y a la pérdida de importancia relativa de los sumandos que son más importantes a pequeñas temperaturas con respecto a la suma completa.
- El comportamiento señalado en el punto 7 se puede achacar a que la rotura de equilibrio es muy pequeña en todas las expansiones a partir de una temperatura dada. En estos casos $T_r \simeq T_t$, lo que significa que el gas está cerca del equilibrio termodinámico y las derivadas de T_r se hacen muy pequeñas. Las diferencias entre las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down}}$ y $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ se vuelven importantes, dando lugar a sumandos en la RMEQ con errores mayores incluso que el módulo de la propia derivada determinada experimentalmente (LHT_i). Por lo tanto, en las expansiones a 2000 mbar descartaremos los puntos con $T_t > 18$ K, a 1000 mbar aquéllos con $T_t > 22$ K y a 500 mbar los que cumplan que $T_t > 28$ K. Por ello no han sido representados en la Figura 11.10.

TABLA 11.9.— Factor de escala promedio

T_t (K)	R	ΔR	$\Delta R/R$ (%)
4	0.83	0.12	14.5
6	0.68	0.08	11.8
8	0.62	0.06	9.7
10	0.60	0.04	6.7
14	0.593	0.025	4.2
18	0.612	0.015	2.4
22	0.649	0.020	3.1
28	0.73	0.04	5.5
35	0.855	0.015	1.8

En la Tabla se presentan los factores de escala promedio de las 4 expansiones y sus errores absolutos y relativos. Los valores de R promedio de esta Tabla han sido calculados utilizando los factores de escala de las especies o-N₂ y p-N₂ de las 4 expansiones. En estos promedios se ha considerado la expansión a 200 mbar con $T_t \leq 35$ K, a 500 mbar con $T_t \leq 28$ K, a 1000 mbar con $T_t \leq 22$ K y a 2000 mbar si $T_t \leq 18$ K (ver texto).

El comportamiento de los factores de escala para todas las expansiones es muy similar y la dispersión de la nube de puntos es pequeña con respecto a los valores adoptados por los primeros. Por lo tanto, se puede determinar un factor de escala promedio, $R(T_t)$, junto con su incertidumbre para cada T_t (ver Figura 11.10; Tabla 11.9), con los que extraer información genérica acerca de las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ y, en última instancia, del potencial intermolecular utilizado en los cálculos. De este proceso de promediado se han obtenido factores de escala con errores relativos menores al 15 % y con un error relativo promedio $\simeq 5$ %.

La determinación del factor de escala promedio en función de T_t ha permitido el escalado de las tasas de transferencia y la obtención de las que en adelante se llamarán *tasas de transferencia escaladas experimentalmente*, $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,es}}$, definidas como $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,es}} = R(T_t) k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ (Tabla B.2). Utilizando estas nuevas tasas de transferencia se ha podido recalcular la suma presente en la RMEQ (ver Figura 11.11).

En la Figura están representadas las derivadas experimentales y las calculadas con la RMEQ para los niveles $J = 0, 1, 2, 3$ y 4 para todas las expansiones estudiadas, aplicando y sin aplicar el factor de escala promedio. Las derivadas temporales de las poblaciones calculadas con las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,es}}$ están en general en muy buen acuerdo con las derivadas experimentales cuando $T_t \leq 22$ K. Para $T_t = 28$ K existe un porcentaje significativo de derivadas calculadas no compatibles con las experimentales, aumentando este porcentaje para $T_t = 35$ K. En el caso de los 4 primeros niveles rotacionales en la expansión a 200 mbar, las derivadas calculadas están dentro del intervalo de error de los experimentos para todos los valores de T_t . En el resto de las expansiones únicamente ocurre esto para el nivel $J = 3$.

Llama la atención que la derivada calculada de la población P_4 en la expansión a 200 mbar no representa bien los datos experimentales a $T_t = 35$ K, cuando el factor de escala $R(T_t)$ ha sido determinado únicamente a partir de las poblaciones P_0 y P_1 de esta expansión. Esto puede ser debido a la falta de completitud del conjunto de tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ utilizado. Igualmente, las grandes diferencias existentes entre las derivadas experimentales y las calculadas escaladas a $T_t = 35$ K (y en menor grado a 28 K) en las expansiones a 1000 y 2000 mbar no parecen ser significativas debido a la falta de tasas de transferencia. Para las expansiones con $p_0 > 200$ mbar, las derivadas calculadas son demasiado pequeñas con respecto a las derivadas experimentales en los niveles con $J < 3$ y demasiado grandes en el nivel con $J = 4$. Este comportamiento es esperable puesto que el número total de moléculas se conserva y, por lo tanto, la suma de las derivadas de las poblaciones es igual a cero. El efecto de la falta de sumandos en la RMEQ por la falta de completitud del conjunto de tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ en las derivadas asociadas a los niveles inferiores es el opuesto al mismo

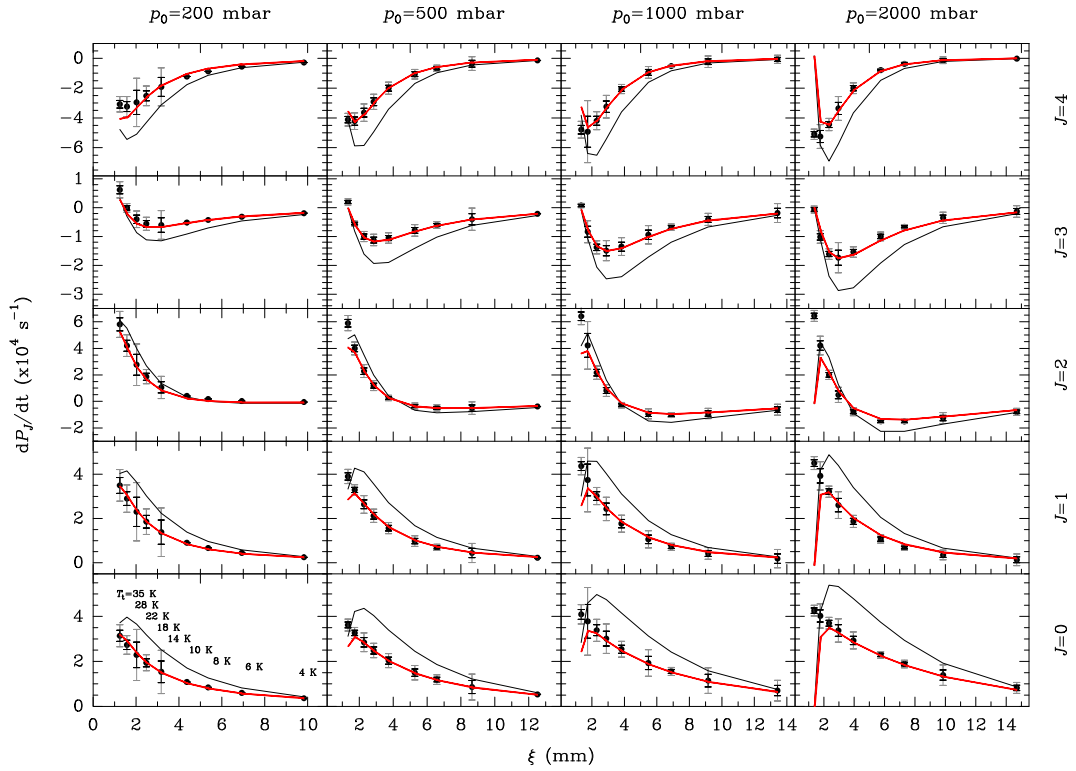


FIGURA 11.11.— Derivadas temporales de las poblaciones escaladas a lo largo de la expansión. Las columnas representan las expansiones, comenzando en la columna de la izquierda con aquella a 200 mbar y aumentando la presión en precámara hacia la derecha. Las filas contienen las gráficas relacionadas con el nivel rotacional J , estando ordenadas desde $J = 0$ (fila inferior) hasta $J = 4$ (fila superior). En cada gráfica se han representado las derivadas temporales experimentales de las poblaciones (puntos negros), las derivadas calculadas con la RMEQ y las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ (curva continua negra) y las derivadas calculadas con la RMEQ y las tasas escaladas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,es}}$ (curva continua roja), todas ellas en función de la distancia a la boca de tobera. Las derivadas temporales experimentales de las poblaciones han sido complementadas con sus errores (1σ en negro y 2σ en gris). Hay que hacer notar que la curva continua roja *no es un ajuste* a las nubes de puntos. En la mayor parte de los puntos las derivadas obtenidas mediante la RMEQ y las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,es}}$ entran dentro del intervalo de error. Sin embargo, hay ciertos puntos que no están bien representados por los resultados de los cálculos, principalmente los puntos a 35 K y algunos a 28 K (ver texto).

en los niveles superiores.

11.5.2. Estudio individual de las tasas de transferencia

Un concepto muy útil para el análisis de los resultados numéricos es el de *espectro colisional*, introducido por primera vez por [Montero et al. \(2006, ver Figuras 11.12–11.15\)](#). Un espectro colisional es una representación del valor de cada sumando de la RMEQ (Ec. 10.36; ordenadas) en función de la energía del proceso colisional asociado (abscisas) para la derivada temporal de la población i -ésima. Suponiendo el proceso colisional $A(i) + A(j) \rightarrow A(l) + A(m)$, la parte negativa del eje de las abscisas da cuenta de los procesos con energía negativa, es decir, en los que se pierde energía rotacional globalmente (procesos *down*, $i(i+1) + j(j+1) - l(l+1) - m(m+1) > 0$). La parte positiva trata los procesos colisionales en los que se gana energía rotacional globalmente, es decir, aquéllos con energía positiva

$(i(i+1) + j(j+1) - l(l+1) - m(m+1) < 0$; procesos *up*).

Los sumandos de la RMEQ pueden ser positivos o negativos independientemente de si están relacionados con procesos de ganancia o pérdida global de energía rotacional. Los sumandos con valores positivos suponen un aumento de la población considerada mientras que los negativos dan cuenta de la disminución de ésta. Por ello, es común tener espectros colisionales para las poblaciones de menor J en los que la mayor parte de los procesos *down* presentan barras positivas y los procesos *up*, barras negativas (ver Figuras 11.12–11.15). El caso de los niveles con energía rotacional mayor es más incierto pudiendo encontrar una cantidad similar de barras positivas y negativas para un mismo tipo de procesos (*up* o *down*). Los niveles poblados de mayor energía tienden a despoblarse al disminuir la temperatura traslacional por lo que sus espectros son similares a los patrones invertidos de los niveles con J pequeño. Por otro lado, la suma de todas las contribuciones a energías negativas proporciona el ritmo de variación de la población debido a procesos *down*, mientras que la suma de las contribuciones con energías positivas da la misma magnitud para procesos *up*. La suma de todas las contribuciones positivas representa el ritmo de crecimiento de la población estudiada mientras que la suma de las contribuciones negativas da el de decrecimiento. Finalmente, la suma de todas las contribuciones (positivas o negativas y a energías positivas o negativas) es la derivada temporal de la población considerada.

Los espectros colisionales para los niveles con J pequeño en un gas en expansión supersónica presentan barras con energías negativas en su mayoría positivas y con longitudes mayores en promedio que las asociadas a los procesos de ganancia (energías positivas). Esto es debido a que la temperatura decae y las poblaciones de los niveles inferiores tienden a aumentar a costa de las de los niveles superiores. En consecuencia, para los niveles inferiores las barras positivas conllevan un enfriamiento del gas y las negativas un calentamiento. Los espectros de los niveles superiores son similares a los de los niveles inferiores pero invertidos con respecto al eje de las abscisas. De este modo, para estos niveles las barras positivas indican un calentamiento y las negativas un enfriamiento del gas.

En las Figuras 11.12–11.15 se han representado tres pares de espectros colisionales a unas las temperaturas traslacionales de 4, 14 y 28 K las cuatro expansiones estudiadas. Cada par está compuesto por los espectros de las poblaciones P_0 y P_1 .

En estos espectros llaman la atención las barras relacionadas con procesos no considerados en la literatura hasta las publicaciones realizadas por el grupo de Fluidodinámica Molecular del IEM. Estos procesos conllevan la variación en los números cuánticos rotacionales de las dos moléculas que intervienen en la colisión, como es el proceso $30 \rightarrow 12$. La existencia de este tipo de colisiones supone que ambas moléculas sufren cambios en la colisión, siendo necesario eliminar la visión del proceso colisional como formado por una molécula que sufre los cambios rotacionales y otra que mantiene sus poblaciones intactas. Este concepto, si bien ha sido útil durante muchos años para profundizar en los mecanismos de colisión, puede llevar a equívocos. Por ejemplo, en el espectro superior-derecho de la Figura 11.13, la mayor contribución a la derivada temporal de la población del nivel $J = 1$ procede del término asociado al proceso $30 \rightarrow 12$, siendo casi el doble de la siguiente contribución en importancia ($32 \rightarrow 12$). Por lo tanto, no es posible desarrollar una teoría completa de las colisiones moleculares sin tener en cuenta estos procesos en los que las dos moléculas que participan en la colisión están afectadas rotacionalmente.

Otra de las conclusiones que se derivan de este análisis es que las contribuciones a la variación temporal de la población i -ésima a una temperatura traslacional dada, dependen directamente de los valores adoptados por las tasas de transferencia colisional $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down}}$ pero también de los valores de los coeficientes $a_{\mu\nu\rho\sigma}$, que dependen a su vez de la densidad y la temperatura rotacional del gas. Por lo tanto, si a un proceso $\mu\nu \rightarrow \rho\sigma$ que se produce a una temperatura traslacional T_t le corresponde una tasa de transferencia con un valor grande pero el coeficiente asociado tiene un valor mucho menor, la contribución a la derivada temporal de la población puede llegar a ser despreciable. Por ejemplo, el proceso colisional con mayor contribución a la derivada temporal de la población P_0 a $T_t = 14$ K en la expansión

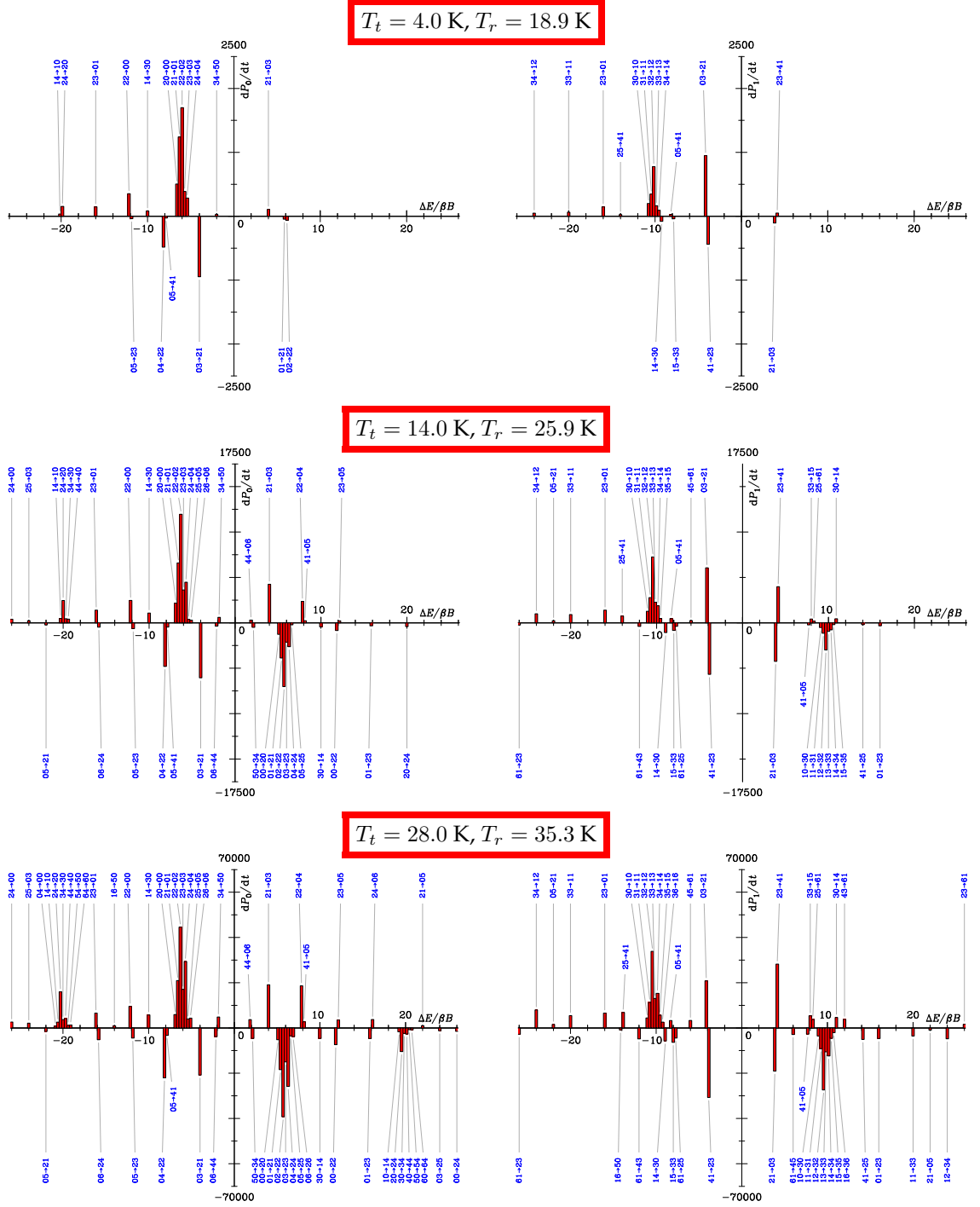


FIGURA 11.12.— Espectros colisionales de la expansión a 200 mbar. Estos diagramas de barras representan las contribuciones a las derivadas temporales de las poblaciones P_0 (izquierda) y P_1 (derecha) utilizando las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,es}}$. La longitud de las barras representa cada sumando $a_{\mu\nu\rho\sigma} k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down}}$ de la RMEQ (Ec. 10.36). En la Figura sólo están representadas las barras correspondientes a los sumandos más importantes. Los espectros superiores corresponden al gas con $T_t = 4.00$ K, que está situado a $\xi = 9451.8 \mu\text{m}$ y tiene $T_r = 18.92$ K y $n = 4.983 \times 10^{20} \text{ m}^{-3}$; los intermedios al gas con $T_t = 14.00$ K en $\xi = 3114.9 \mu\text{m}$ y con $T_r = 25.94$ K y $n = 4.472 \times 10^{21} \text{ m}^{-3}$; y los inferiores al gas con $T_t = 28.00$ K en $\xi = 1579.9 \mu\text{m}$ y con $T_r = 35.32$ K y $n = 1.723 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ (ver el texto para más detalles).

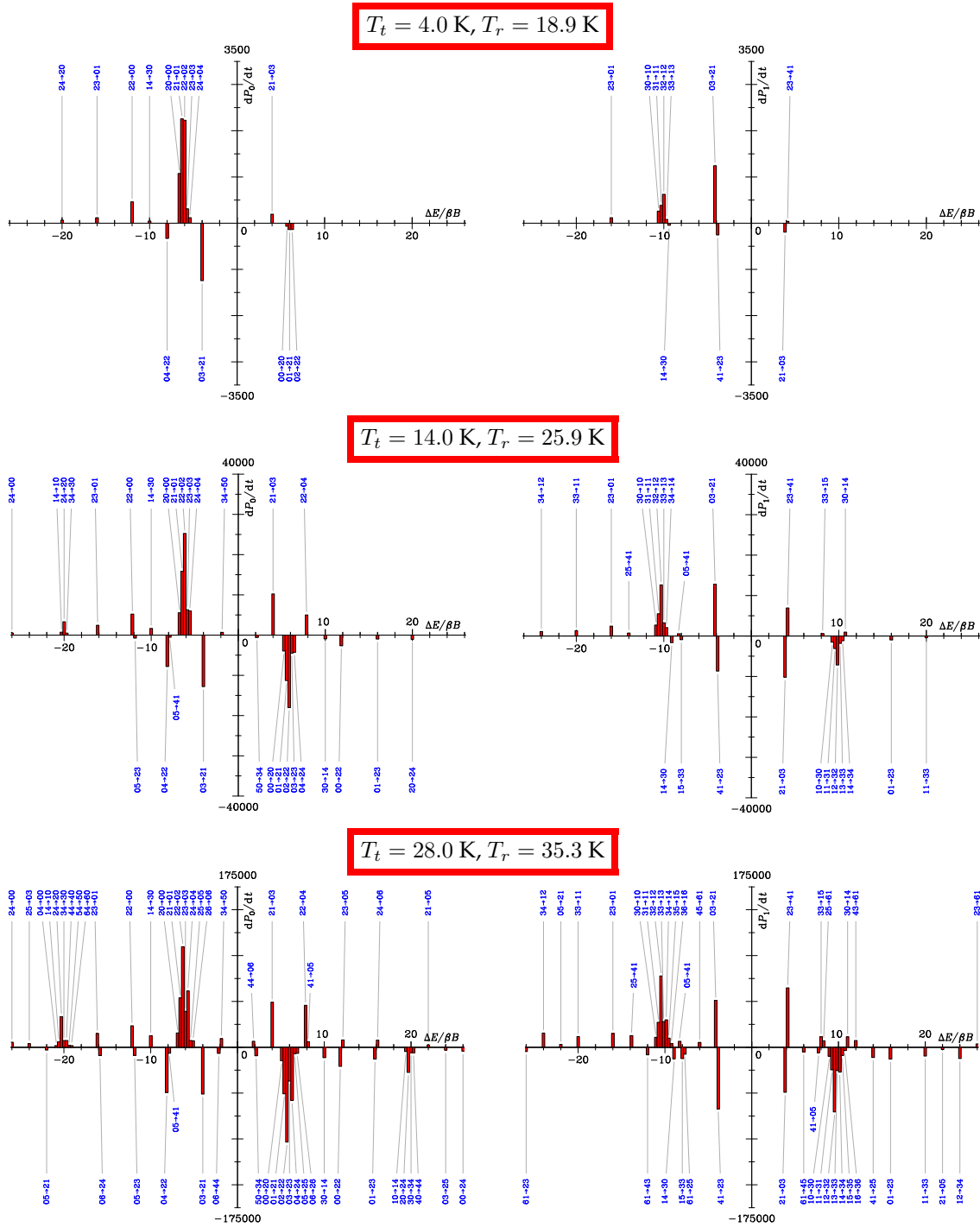
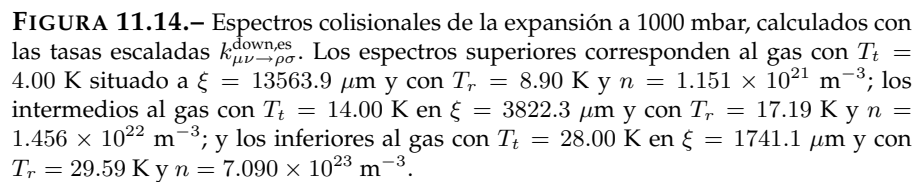


FIGURA 11.13.— Espectros colisionales de la expansión a 500 mbar, calculados con las tasas escaladas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{downes}}$. Los espectros superiores corresponden al gas con $T_t = 4.00 \text{ K}$, situado a $\xi = 12331.6 \text{ } \mu\text{m}$ y con $T_r = 11.68 \text{ K}$ y $n = 7.663 \times 10^{20} \text{ m}^{-3}$; los intermedios al gas con $T_t = 14.00 \text{ K}$ y con $\xi = 3711.4 \text{ } \mu\text{m}$, $T_r = 19.24 \text{ K}$ y $n = 8.263 \times 10^{21} \text{ m}^{-3}$; y los inferiores al gas con $T_t = 28.00 \text{ K}$, situado en $\xi = 1731.7 \text{ } \mu\text{m}$ y con $T_r = 30.94 \text{ K}$ y $n = 3.759 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$.



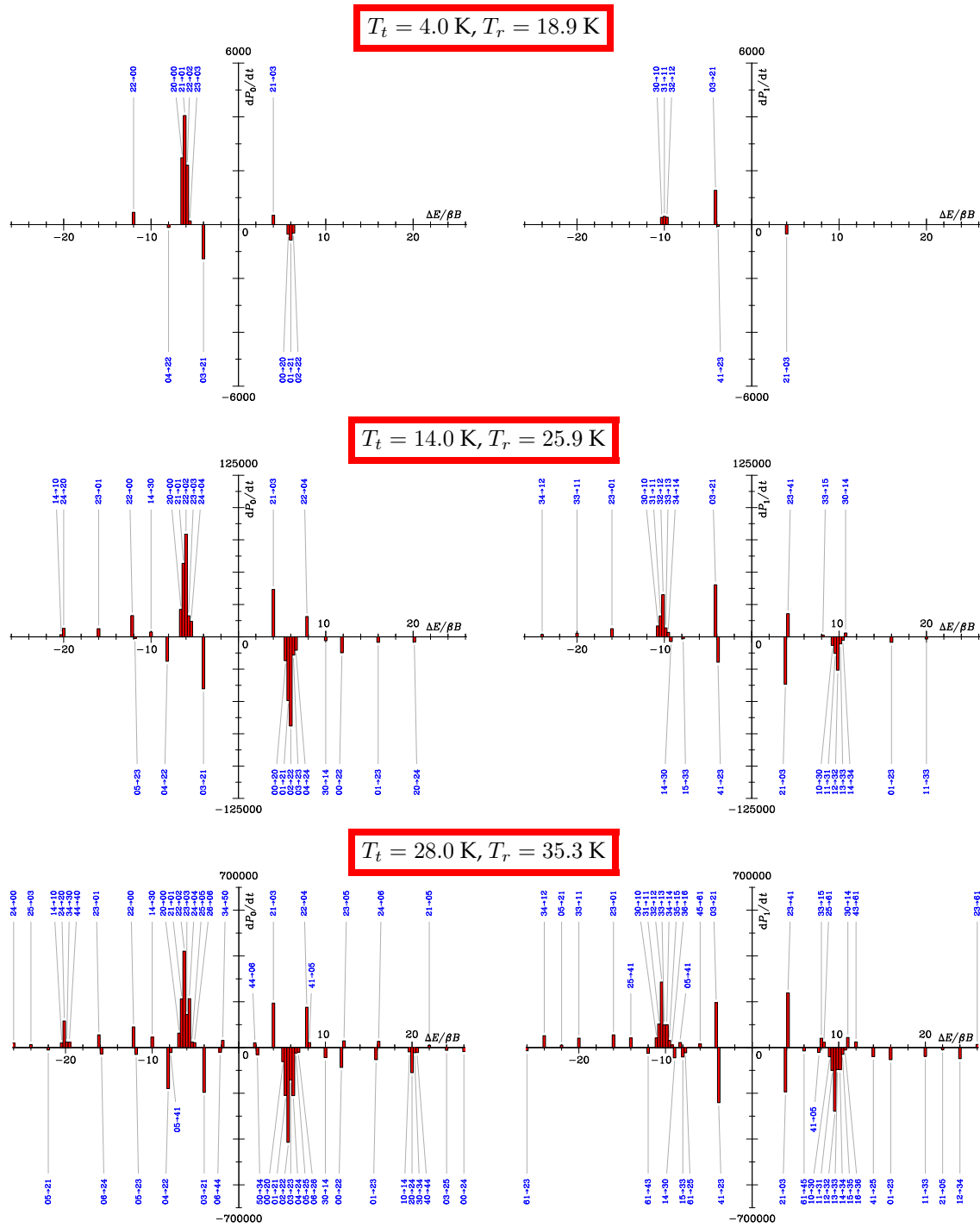


FIGURA 11.15.– Espectros colisionales de la expansión a 2000 mbar, calculados con las tasas escaladas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{downes}}$. Los espectros superiores corresponden al gas con $T_t = 4.00$ K situado a $\xi = 14700.3 \mu\text{m}$ y con $T_r = 7.30$ K y $n = 1.870 \times 10^{21} \text{ m}^{-3}$; los intermedios al gas con $T_t = 14.00$ K en $\xi = 3921.7 \mu\text{m}$ y con $T_r = 15.96$ K y $n = 2.675 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$; y los inferiores al gas con $T_t = 28.00$ K en $\xi = 1767.8 \mu\text{m}$ y con $T_r = 28.73$ K y $n = 1.362 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$.

a 200 mbar (ver Figura 11.12; espectro intermedio-izquierda) es el asociado al sumando $a_{2202}k_{22 \rightarrow 02}^{\text{down,es}}$. La tasa de transferencia escalada $k_{22 \rightarrow 02}^{\text{down,es}} = 2.042 \times 10^{-17} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ siendo la mayor a esa temperatura traslacional la tasa escalada $k_{30 \rightarrow 12}^{\text{down,es}} = 7.395 \times 10^{-17} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. A pesar de que esta última es unas 3.5 veces mayor que $k_{22 \rightarrow 02}^{\text{down,es}}$ la contribución asociada al proceso $30 \rightarrow 12$ es aproximadamente la mitad que la del proceso $22 \rightarrow 02$.

Del estudio de los espectros colisionales se deduce que los procesos que más contribuyen a la derivada temporal de P_0 a temperaturas traslacionales grandes son $22 \rightarrow 02$, $21 \rightarrow 01$, $24 \rightarrow 04$, $03 \rightarrow 21$, $23 \rightarrow 03$, $04 \rightarrow 22$, $22 \rightarrow 00$ y $24 \rightarrow 20$. En el caso de P_1 son $32 \rightarrow 12$, $03 \rightarrow 21$ y $41 \rightarrow 23$, siendo el resto bastante menores. A temperaturas traslacionales pequeñas los procesos que más contribuyen a la derivada de P_0 son $21 \rightarrow 01$, $20 \rightarrow 00$ y $22 \rightarrow 02$, mientras que para P_1 el más importante es $03 \rightarrow 21$. Aquí se observa de nuevo la importancia de las colisiones que involucran transiciones en ambas moléculas: el ritmo de población del nivel $J = 1$ a temperaturas menores a $5 - 10 \text{ K}$ sería mucho más lento si no fuera posible el proceso $03 \rightarrow 21$, lo que cambiaría completamente la evolución de los procesos de relajación rotacional en el $p\text{-N}_2$.

Los resultados anteriores pueden ser aplicados cuando la excitación/desexcitación molecular sea pura o mayormente colisional. La acción de la radiación en un gas de N_2 natural puede modificar sustancialmente estos resultados, poblando los niveles de forma distinta, incluso selectivamente. La forma de estudiar estos nuevos sistemas sería muy similar a la seguida en esta Tesis, pero modificando la MEQ (Ec. 8.13) para incluir estos nuevos mecanismos de bombeo.

11.5.2.1. Errores de las derivadas temporales de las poblaciones y de las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,es}}$

En este punto, tan sólo queda estimar los errores de las derivadas de las poblaciones obtenidas mediante la RMEQ (Ec. 10.36) y discutir los errores de las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,es}}$.

Partiendo de la RMEQ con las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,es}}$

$$\frac{dP_i}{dt} = nR(T_i) \sum_{\mu\nu\rho\sigma} b_{\mu\nu\rho\sigma} k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}, \quad (11.6)$$

donde $b_{\mu\nu\rho\sigma} = a_{\mu\nu\rho\sigma}/n$ (Ec. 10.36). Considerando que las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ no tienen error, el error relativo de la derivada de la población i -ésima es

$$\varepsilon_r \left(\frac{dP_i}{dt} \right) = \varepsilon_r(n) + \varepsilon_r(R) + \varepsilon_r \left(\sum_{\mu\nu\rho\sigma} b_{\mu\nu\rho\sigma} k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}} \right). \quad (11.7)$$

Reescribiendo el último término de la anterior expresión:

$$\varepsilon_r \left(\frac{dP_i}{dt} \right) = \varepsilon_r(n) + \varepsilon_r(R) + \sum_{\mu\nu\rho\sigma} \varepsilon_r(b_{\mu\nu\rho\sigma}) \frac{|b_{\mu\nu\rho\sigma}| k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}}{\sum_{\hat{\mu}\hat{\nu}\hat{\rho}\hat{\sigma}} b_{\hat{\mu}\hat{\nu}\hat{\rho}\hat{\sigma}} k_{\hat{\mu}\hat{\nu} \rightarrow \hat{\rho}\hat{\sigma}}^{\text{down,cc}}}, \quad (11.8)$$

donde las cantidades $|b_{\mu\nu\rho\sigma}| k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}} / \sum_{\hat{\mu}\hat{\nu}\hat{\rho}\hat{\sigma}} b_{\hat{\mu}\hat{\nu}\hat{\rho}\hat{\sigma}} k_{\hat{\mu}\hat{\nu} \rightarrow \hat{\rho}\hat{\sigma}}^{\text{down,cc}}$ representan la importancia de cada sumando dentro de la suma. Cuando la temperatura es pequeña los términos positivos son en general mucho mayores que los negativos (ver Figuras 11.12–11.15). En este caso, la contribución de los coeficientes $b_{\mu\nu\rho\sigma}$ al error de las derivadas no se ve incrementada por cancelaciones en la suma $\sum_{\hat{\mu}\hat{\nu}\hat{\rho}\hat{\sigma}} b_{\hat{\mu}\hat{\nu}\hat{\rho}\hat{\sigma}} k_{\hat{\mu}\hat{\nu} \rightarrow \hat{\rho}\hat{\sigma}}^{\text{down,cc}}$. En estas condiciones los términos que contribuyen al error de forma significativa son relativamente pocos y se puede considerar que $\sum_{\mu\nu\rho\sigma} |b_{\mu\nu\rho\sigma}| k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}} / \sum_{\hat{\mu}\hat{\nu}\hat{\rho}\hat{\sigma}} b_{\hat{\mu}\hat{\nu}\hat{\rho}\hat{\sigma}} k_{\hat{\mu}\hat{\nu} \rightarrow \hat{\rho}\hat{\sigma}}^{\text{down,cc}} \sim 1$. Si la temperatura es grande existen muchas cancelaciones, la suma se hace pequeña incrementando el error relativo de las derivadas.

En general, los coeficientes $b_{\mu\nu\rho\sigma}$ están compuestos por dos sumandos que contienen el producto de dos poblaciones (Ec. 10.38). Uno de ellos tiene una exponencial del tipo

$e^{-\beta \Delta E_r / T_t}$, donde ΔE_r es la variación de la energía del proceso *down*. En la mayor parte de los casos el término con la exponencial es menor que el 10 % del otro término y se puede despreciar en primer orden de aproximación. Por lo tanto, es posible suponer que $\varepsilon_r(b_{\mu\nu\rho\sigma}) \simeq \varepsilon_r(P_\mu P_\nu) = 2\varepsilon_r(P_\mu)$. Una estimación global sobre el error relativo (1σ) de las poblaciones, $\langle \varepsilon_r(P) \rangle$, se puede encontrar en la Sección 11.2.3 y resulta ser $\sim 5\%$. Por lo tanto, considerando que $\varepsilon_r(P_\mu) \sim \langle \varepsilon_r(P) \rangle$, $\varepsilon_r(b_{\mu\nu\rho\sigma}) \sim 2\langle \varepsilon_r(P) \rangle$ y

$$\sum_{\mu\nu\rho\sigma} \varepsilon_r(b_{\mu\nu\rho\sigma}) \frac{|b_{\mu\nu\rho\sigma}| k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}}{\sum_{\hat{\mu}\hat{\nu}\hat{\rho}\hat{\sigma}} b_{\hat{\mu}\hat{\nu}\hat{\rho}\hat{\sigma}} k_{\hat{\mu}\hat{\nu} \rightarrow \hat{\rho}\hat{\sigma}}^{\text{down,cc}}} \sim 2 \sum_{\mu\nu\rho\sigma} \langle \varepsilon_r(P) \rangle \frac{|b_{\mu\nu\rho\sigma}| k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,cc}}}{\sum_{\hat{\mu}\hat{\nu}\hat{\rho}\hat{\sigma}} b_{\hat{\mu}\hat{\nu}\hat{\rho}\hat{\sigma}} k_{\hat{\mu}\hat{\nu} \rightarrow \hat{\rho}\hat{\sigma}}^{\text{down,cc}}} \sim 2\langle \varepsilon_r(P) \rangle. \quad (11.9)$$

En consecuencia, cuando la temperatura traslacional es lo suficientemente pequeña,

$$\varepsilon_r\left(\frac{dP_i}{dt}\right) \sim \varepsilon_r(n) + \varepsilon_r(R) + 2\langle \varepsilon_r(P) \rangle. \quad (11.10)$$

Introduciendo en la anterior expresión los valores numéricos de las magnitudes, $\varepsilon_r(dP_i/dt) \simeq 20\%$ en las mejores condiciones. Comparando estos errores relativos con los obtenidos para las derivadas de las poblaciones ($\simeq 10 - 15\%$, pág. 205), se ve que los primeros son algo más grandes que los segundos pero similares y compatibles entre sí.

En la comparación entre las derivadas experimentales y las obtenidas con la RMEQ, los errores más importantes y que contienen información más significativa sobre los procesos de colisión son los asociados a las primeras. Esto supone que las magnitudes involucradas en la RMEQ pueden variar con respecto a los valores obtenidos siempre que la derivada generada esté dentro de los intervalos determinados experimentalmente. Sin embargo, los errores de las derivadas hallados a partir de la RMEQ son mayores que los experimentales, lo que sugiere la posibilidad de que $\varepsilon_r(R)$ y/o $\varepsilon_r(b_{\mu\nu\rho\sigma})$ estén sobrestimados.

En conclusión y considerando que el error de R es el error de las tasas $k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,es}}$, se cumple que $\varepsilon_r(k_{\mu\nu \rightarrow \rho\sigma}^{\text{down,es}}) \lesssim 5\% (1\sigma)$.

Capítulo 12

Resumen, conclusiones finales y perspectivas

Una vez expuesto el trabajo realizado y los resultados del tratamiento de los datos experimentales y numéricos, se puede pasar a hacer un resumen y enumerar las conclusiones. Posteriormente, se hablarán de posibles estudios futuros utilizando la técnica, el montaje experimental y la metodología desarrollada en la presente Tesis.

Esta investigación está basada en la utilización de la ecuación maestra para el estudio de un gas de N_2 natural en expansión con el fin de imponer restricciones experimentales a un conjunto de tasas de transferencia calculadas numéricamente. La información sobre el gas obtenida gracias a la técnica no intrusiva de la espectroscopía Raman lineal ha permitido determinar las condiciones físicas (densidad absoluta y temperatura rotacional) del N_2 en una serie de puntos del eje de 4 expansiones supersónicas generadas a presiones distintas. Utilizando estas dos magnitudes se han calculado la temperatura traslacional del gas, su velocidad de expansión y la derivada temporal de las poblaciones del N_2 a lo largo del eje de la expansión con precisiones lo suficientemente buenas como para imponer las restricciones a las tasas de transferencia.

Los datos numéricos han sido calculados con el método *close-coupling* y constan de 148 tasas de transferencia independientes, $k_{\mu\nu\rightarrow\rho\sigma}^{\text{down,cc}}$, con $J \leq 7$ y energías rotacionales menores de 263 cm^{-1} ó $70\beta B$. De la imposición de las restricciones experimentales halladas sobre estos datos se han obtenido las siguientes conclusiones, a saber:

1. De acuerdo con los datos experimentales derivados del análisis de las expansiones, las tasas $k_{\mu\nu\rightarrow\rho\sigma}^{\text{down,es}}$ propuestas a partir de $k_{\mu\nu\rightarrow\rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ representan a $k_{\mu\nu\rightarrow\rho\sigma}^{\text{down}}$ con una precisión mejor que el 10 %. Si bien es arriesgado afirmar que todas las $k_{\mu\nu\rightarrow\rho\sigma}^{\text{down,es}}$ cumplen esto, sí lo hacen las tasas relacionadas con los procesos más importantes (señalados en amarillo en la Tabla B.2).
2. Las tasas $k_{\mu\nu\rightarrow\rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ calculadas numéricamente a partir de la vdA-PES (van der Avoird et al., 1986; Cappelletti et al., 1998) son hasta un factor $\simeq 2$ mayores que las tasas $k_{\mu\nu\rightarrow\rho\sigma}^{\text{down,es}}$. Esto implica que la vdA-PES no es buena en la zona de repulsión muestreada por el experimento, tanto en su componente independiente de la configuración rotacional de las moléculas en colisión (genérica para todas las configuraciones) como de su componente dependiente de esta configuración.
3. El estudio experimental de gases expandidos supersónicamente mediante las técnicas de la espectroscopía Raman lineal junto con la metodología desarrollada durante este trabajo, se revelan como muy útiles en la determinación de las tasas de transferencia de moléculas ligeras a temperaturas traslacionales de hasta 180 K (Tejeda et al., 2008). Gracias a que el método desarrollado por el grupo de Fluidodinámica Molecular del IEM permite restringir experimentalmente los resultados de las simulaciones

numéricas, es posible obtener información y mejorar progresivamente las superficies de energía potencial moleculares propuestas para una gran variedad de especies.

4. A pesar de disponer de datos numéricos hasta 50 K, no ha sido posible imponer ninguna restricción a las tasas de transferencia colisional a partir de 35 K debido a la falta de completitud del conjunto de tasas calculadas. Conforme aumenta la temperatura traslacional el número de tasas necesarias para el cálculo de las derivadas de las poblaciones crece rápidamente, pudiendo esta carencia afectar significativamente a la derivada calculada con la ecuación maestra. No obstante, mediante la adición de nuevas tasas de transferencia al conjunto ya calculado sería posible ampliar el estudio realizado a temperaturas mayores.

A pesar de los buenos resultados conseguidos con el montaje actual, éste sigue siendo susceptible de ser mejorado. La utilización de toberas planas y expansiones generadas a presiones menores a 200 mbar permitirían incrementar la calidad de los datos experimentales a temperaturas mayores de 35 K y determinar nuevos datos por encima de los 50 K, gracias a la reducción de los gradientes cerca de la boca de tobera y al aumento de la rotura de equilibrio. Ambas modificaciones deberían dar lugar a datos de muy buena calidad que ampliaran el rango de la función de escala $R(T_i)$ determinada durante la presente investigación. Por otro lado, la inclusión en el montaje de un regulador de temperatura en la tobera que permitiera calentar el gas en expansión, tendría una doble utilidad:

1. aumentar el valor máximo del rango de temperaturas estudiado experimentalmente, y
2. permitir el estudio de especies moleculares que pudieran sufrir condensación a lo largo de la expansión, como es el caso del CO_2 y el H_2O .

Los cálculos numéricos basados en el método *close-coupling* parecen ser capaces de estimar las tasas colisionales por encima de 35 K con el suficiente tiempo de cálculo. Hoy en día, existen máquinas más potentes que la utilizada en esta investigación que podrían generar las tasas de transferencia buscadas a temperaturas mayores incluso a 50 K. Sin embargo, se deberá esperar al futuro para poder encontrar sistemas capaces de realizar los cálculos a temperaturas más próximas a la ambiente en tiempos razonables. Conforme se vaya avanzando en esa dirección, el experimento utilizado en esta Tesis se podrá utilizar para testar los resultados numéricos impulsando la mejora no sólo de la PES usada en dichos cálculos sino del método en sí mismo.

En el futuro próximo y habiendo observado los buenos resultados de este trabajo, sería muy interesante estudiar otras moléculas importantes como son el CO, el H_2O , el O_2 , el C_2H_2 o el HCN, por ejemplo. Las moléculas sencillas no sólo son muy importantes para el campo de la Astrofísica sino también para todos los campos de la ciencia que tengan que ver con dinámica de gases. De hecho, las tasas de transferencia colisionales son la fuente para los cálculos rigurosos de todos los coeficientes de transporte como la viscosidad, la conductividad térmica o los coeficientes de difusión, entre otras.

En conclusión, este experimento abre las puertas al conocimiento profundo de las interacciones colisionales entre las moléculas de un gas, del cuál una gran cantidad de disciplinas se beneficiarán en los años venideros.

Bibliografía

- Agúndez, M. & Cernicharo, J., 2006, *Ap. J.*, 650, 374
- Agúndez, M., Fonfría, J. P., Cernicharo, J., Pardo, J. R. & Guelín, M., 2008, *Astron. Astroph.*, 479, 493
- Andersen, A. C., 2007, *ASP Conference Series*, 378, 170
- Anderson, A., "The Raman Effect, Vol. 2: Applications", Ed. Marcel Dekker, New York, 1973, ISBN: 0-8247-1015-0
- Aoiz, F. J., Díez-Rojo, T., Herrero, V. J., Martínez-Haya, B., Menéndez, M., Quintana, P., Ramonat, L., Tanarro, I., & Verdasco, E., 1999, *J. Chem. Phys.*, 110, 823
- Arie, E. & Johns, J. W. C., 1992, *J. Mol. Spec.*, 155, 195
- Arthurs, A. M. & Dalgarno, A., 1960, *Proc. R. Soc.*, 256, 540
- Ashkenas, H. and Sherman, F. S., "Rarefied Gas Dynamics", Proceedings of the 4th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Academic Press, 1965
- Bachiller, R., Forveille, T., Huggins, P. J., Cox, P., 1997, *Astron. Astroph.*, 324, 1123
- Balescu, R., "Equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics", John Wiley & Sons Inc., 1975, ISBN: 0-471-04600-0
- Balick, B., 1987, *Ap. J.*, 94, 671
- Balick, B. & Frank, A., 2002, *An. Rev. Astron. Astroph.*, 40, 439
- Barrow, G. M., "Introduction to Molecular Spectroscopy", McGraw-Hill, 1962, ISBN: 0070038708
- Baskakov, O. I., Dyubko, S. F., Ilyushin, V. V., Efimenko, M. N., Efrenov, V. A., Podnos, S. V. & Alekseev, E. A., 1996, *J. Mol. Spec.*, 179, 94
- Becklin, E. E. & Neugebauer, G., 1967, *Ap. J.*, 147, 799
- Beckwith, S., Persson, S. E., & Gatley, I., 1978, *Ap. J.*, 219, L33
- Beers, Y. & Klein, G. P., 1972, *J. Mol. Spec.*, 44, 553
- Begemann, B., Dorschner, J., Henning, T., Mutschke, H., & Thamm, E., 1994, *Ap. J.*, 423, 71
- Belikov, A. E., Burshtein, A. I., Dolgushev, S. V., Storozhev, A. V., Strekalov, M. L., Sukhinin, G. I., & Sharafutdinov, R. G., 1989, *Chem. Phys.*, 139, 239
- Belikov, A. E., Sharafutdinov, R. G., & Strekalov, M. L., 1994, *Chem. Phys. Letters*, 231, 444
- Belikov, A. E. & Sharafutdinov, R. G., 1995, *Chem. Phys. Letters*, 241, 209

- Belikov, A. E., Sharafutdinov, R. G., & Storozhev, A. V., 1996, *Chem. Phys.*, 213, 319
- Bendtsen, J., 1974, *J. Raman Spec.*, 2, 133
- Bergeat, J., Knapik, A., & Rutily, B., 2001, *Astron. Astroph.*, 369, 178
- Bergeat, J. & Chevallier, L., 2005, *Astron. Astroph.*, 429, 235
- Bernes, C., 1979, *Astron. Astroph.*, 73, 67
- Bernstein, R. B. (Ed.), "Atom-Molecule Collision Theory: Guide for the Experimentalist", Springer-Verlag New York, LLC, 1979, ISBN: 0306401215
- Betz, A. L., 1981, *Ap. J.*, 244, L103
- Bieging, J., H. & Nguyen-Q-Rieu, 1989, *Ap. J. Letters*, 343, L25
- Bocquet, R., Chen, W. D., Papoušek, D., Wlodarczak, G. & Demaison, J., 1994, *J. Mol. Spec.*, 164, 456
- Böhm-Vitense E., "Introduction to stellar astrophysics, Vol. 3: Stellar structure and evolution", Cambridge University Press 1992, ISBN: 0-521-34404-2, 0-521-34871-4
- Bonamy, L., Bonamy, J., Robert, D., Lavorel, B., Saint-Loup, R., Chaux, R., Santos, J., & Berger, H., 1988, *J. Chem. Phys.*, 89, 5568
- Bonamy, L., Thuét, J. M., Bonamy, J., & Robert, D., 1991, *J. Phys. Chem.*, 95, 3361
- Bowen G.H., 1988, *Ap. J.*, 329, 299
- Bowers R. & Deeming T., "Astrophysics I: Stars", Jones & Bartlett Publishers, Inc. 1984, ISBN: 0-86720-018-9
- Boyle, R. J., Keady, J. J., Jennings, D. E., Hirsch, K. L.; Wiedemann, G. R., 1994, *Ap. J.*, 420, 863
- Brunner, T. A. & Pritchard, D., 1982, *Adv. Chem. Phys.*, 50, 589
- Bujarrabal, V. & Nguyen-Q-Rieu, 1981, *Astron. Astroph.*, 102, 65
- Bujarrabal, V., Gómez-González, J., Bachiller, R., et al., 1988, *Astron. Astroph.*, 204, 242
- Bujarrabal, V., Fuente, A., & Omont, A., 1994, *Astron. Astroph.*, 285, 247
- Bujarrabal, V., Castro-Carrizo, A., Alcolea, J., Sánchez-Contreras, C., *Astron. Astroph.*, 377, 868
- Burton, M. G. & Geballe, T. R., 1986, *Monthly Notices of the RAS*, 223, 13
- Calvet, N. & Cohen, M., 1978, *Monthly Notices of the RAS*, 182, 687
- Calvet, N. & Peimbert, M., 1983, *Revista Mexicana de Astronomía y Astrofísica*, 5, 319
- Cannon, C. J., 1973, *Ap. J.*, 185, 621
- Cappelletti, D., Vecchiocattivi, F., Pirani, F., Heck, E. L., & Dickinson, A. S., 1998, *Mol. Phys.*, 93, 485
- Carlström, U., Olofsson, H., Johansson, L. E. B., Nguyen-Q-Rieu, Sahai, R., 1990, "From Miras to Planetary Nebulae", Eds. M. O. Mennessier and A. Omont, Ed. Frontiers, Gif-sur-Yvette, p. 170, ISBN: 2-86332-077-7
- Castor J.I., 1970, *Monthly Notices of the RAS*, 149, 111

- Cattolica, R., Robben, F., Talbot, L., & Willis, D. R., 1974, *Phys. Fluids*, 17, 1793
- Cazzoli, G. & Kisiel, Z., 1988, *J. Mol. Spec.*, 130, 303
- Cernicharo, J. 1985, "ATM: A Program to Compute Atmospheric Opacity between 0 and 1000 GHz", IRAM Internal Report
- Cernicharo, J. & Guélin, M., 1987, *Astron. Astroph.*, 183, L10
- Cernicharo, J., Guélin, M., Martín-Pintado, J., Peñalver, J., & Mauersberger, R., 1989, *Astron. Astroph. Letters*, 222, L1
- Cernicharo, J., Bujarrabal, V., & Lucas, R., 1991, *Astron. Astroph.*, 249, L27
- Cernicharo, J. & Bujarrabal, V., 1992, *Ap. J. Letters*, 401, L109
- Cernicharo, J., Bujarrabal, V., & Santarén, J., L., 1993, *Ap. J. Letters*, 407, L33
- Cernicharo, J. & Guélin, M., 1996a, *Astron. Astroph.*, 309, L27
- Cernicharo, J., Barlow, M. J., González-Alfonso, E. et al., 1996b, *Astron. Astroph.*, 315, L201
- Cernicharo, J., Yamamura, I., González-Alfonso, E., de Jong, T., Heras, A. M., Escribano, R., Ortigoso, J., 1999, *Ap. J.*, 526, 41
- Cernicharo, J., Guélin, M., & Kahane, C., 2000, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, 142, 181
- Cernicharo, J., Heras, A. M., Tielens, A. G. G. M., Pardo, J. R., Herpin, F., Guélin, M., Waters, L. B. F. M., 2001, *Ap. J.*, 546, L123
- Cernicharo, J., Heras, A. M., Pardo, J. R., Tielens, A. G. G. M., Guélin, M., Dartois, E., Neri, R., Waters, L. B. F. M., 2001, *Ap. J. Letters*, 546, L127
- Cernicharo, J., 2004, *Ap. J.*, 608, L41
- Cernicharo, J., Guélin, M., & Pardo, J. R., 2004, *Ap. J. Letters*, 615, L145
- Cherchneff, I., Barker, J. R., & Tielens, A. G. G. M., *Ap. J.*, 1992, 401, 269
- Cherchneff, I., 2006, *Astron. Astroph.*, 456, 1001
- Clayton D.D., "Principles of stellar evolution and nucleosynthesis", McGraw-Hill, Inc. 1968, ISBN: 07-011295-9
- Clouthier, D. J. & Ramsay, D. A., 1983, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, 34, 31
- Colmont, J. M., Wlodarczak, G., Priem, D., Müller, H. S. P., Tien, E. H., Richards, R. J. & Gerry, M. C. L., 1997, *J. Mol. Spec.*, 181, 330
- Combes, F., Gerin, M., Wooten, A., Wlodarczak, G., Clausset, F. & Encrenaz, P. I., 1987, *Astron. Astroph.*, 180, L13
- Cox, P., Lucas, R., Huggins, P. J., Forveille, T., Bachiller, R., Guilloteau, S., Maillard, J. P., Omont, A., 2000a, *Astron. Astroph.*, 353, L25
- Cox, A. N., ed. 2000b, *Allen's Astrophysical Quantities* (4th ed.; New York: AIP)
- Crosas, M. & Menten, K. M., 1997, *Ap. J.*, 483, 913
- Dayal, A. & Bieging, J. H., 1993, *Ap. J.*, 407, L37
- Dayal, A. & Bieging, J. H., 1995, *Ap. J.*, 439, 996

- Demaison, J., Cosléou, J., Bocquet, R. & Lesarri, A. G., 1994, *J. Mol. Spec.*, 167, 400
- DePristo, A. E., Augustin, S. D., Ramaswamy, R., & Rabitz, H., 1979, *J. Chem. Phys.*, 17, 850
- Deutsch, A. J., 1956, *Astron. J.*, 61, 174
- Di Lonardo, G., Ferracuti, P., Fusina, L., Venuti, E., & Johns, J. W. C., 1993, *J. Mol. Spec.*, 161, 466
- Di Lonardo, G., Baldan, A., Bramati, G., Fusina, L., 2002, *J. Mol. Spec.*, 213, 57
- Diep, P. & Johnson, J. K., 2000, *J. Chem. Phys.*, 112, 4465
- Dominik, C., Gail, H. P., Sedlmayr, E., & Winters, J. M., 1990, *Astron. Astroph.*, 240, 365
- Doty, S. D. & Leung, C. M., 1997, *Memoirs of the RAS*, 286, 1003
- Draine, B. T., 2003, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, 41, 241
- Dubrulle, A., Boucher, D., Burie, J. & Demaison, J., 1978, *J. Mol. Spec.*, 72, 158
- Dwarkadas, V., Chevalier, R. A., & Blondin, J. M., 1996, *Ap. J.*, 457, 773
- Dyck, H. M., Benson, J. A., Howell, R. R., Joyce, R. R., Leinert, Ch., 1991, *Ap. J.*, 102, 200
- Edwards, R. H. & Cheng, H. K., "Rarefied Gas Dynamics", Proceedings of the 5th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, p. 819, 1967
- Elitzur, M., 1992, *An. Rev. Astron. Astroph.*, 30, 75
- Fonfría Expósito, J. P., Agúndez, M., Tercero, B., Pardo, J. R., & Cernicharo, J., 2006, *Ap. J.*, 646, L127
- Fonfría, J. P., Ramos, A., Thibault, F., Tejeda, G., Fernández, J. M. & Montero, S., 2007, *J. Chem. Phys.*, 127, 134305
- Fonfría, J. P., Cernicharo, J., Richter, M. J. & Lacy, J. H., 2008a, *Ap. J.*, 673, 445
- Fonfría, J. P., Cernicharo, J., Richter, M. J. & Lacy, J. H., 2008b (enviado a la revista *Ap. J.*)
- Frenklach, M. & Feigelson, E., 1997, *ASP Conference Series*, 122, 107
- Gilman, R. C., 1972, *Ap. J.*, 178, 423
- Glassgold, A. E., Huggins, P. J., & Langer, W. D., 1985, *Ap. J.*, 290, 615
- Glassgold, A. E., 1996, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, 34, 241
- Gioumoussis, G. & Curtiss, C. F., 1958, *J. Chem. Phys.*, 29, 996
- Goicoechea, J. R., Cernicharo, J., Masso, H. & Senent, M. L., 2004, *Ap. J.*, 609, 225
- Goldflam, R., Green, S., & Kouri, D. J., 1977, *J. Chem. Phys.*, 67, 4149
- Goldreich P. & Scoville N., 1976, *Ap. J.*, 205, 144
- Gómez, L., Martínez, R. Z., Bermejo, D., Thibault, F., Joubert, P., Bussery-Honvault, B., & Bonamy, J., 2007, *J. Chem. Phys.*, 126, 204302
- González-Alfonso, E. & Cernicharo, J., 1993, *Astron. Astroph.*, 279, 506
- González-Alfonso, E., Alcolea, J., & Cernicharo, J., *Astron. Astroph.*, 1996, 313, L13
- González-Alfonso, E. & Cernicharo, J., *Astron. Astroph.*, 322, 938

- Goodrich, R. W., 1991, *Ap. J.*, 376, 654
- Gottlieb, E. W. & Liller, Wm., 1976, *Ap. J.*, 207, L135
- Gough, T. E. & Miller, R. E., 1982, *J. Chem. Phys.*, 78, 4486
- Graur, I. A., Elizarova, G., Ramos, A., Tejeda, G., Fernandez, J. M., & Montero S., 2004, *J. Fluid Mech.*, 504, 239
- Gray, M., 1999, *Philos. Trans. R. Soc. London A.*, 357, 3277
- Green, S., 1975, *J. Chem. Phys.*, 62, 2271
- Green, S., 1993, *J. Chem. Phys.*, 98, 257
- Green, S. & Huo, W., 1996, *J. Chem. Phys.*, 104, 7590
- Groenewegen, M. A. T., 1994, *Astron. Astroph.*, 290, 531
- Groenewegen, M. A. T., 1997, *Astron. Astroph.*, 317, 503
- Guelachvili, G., Craig, A. M., & Ramsai, D. A., 1984, *J. Mol. Spec.*, 105, 156
- Guélin, M., Cernicharo, J., Travers, M. J., McCarthy, M. C., Gottlieb, C. A., Thaddeus, P., Ohishi, M., Saito, S., Yamamoto, S., 1997, *Astron. Astroph.*, 317, L1
- Habing, H. J., 1996, *Astron. Astroph. Rev.*, 7, 97
- Haas, S., Yamada, K. M. T., & Winnewisser, G., 1994, *J. Mol. Spec.*, 164, 445
- Hamel, B. B. & Willis, D. R., 1966, *Phys. Fluids*, 9, 829
- Henkel, C., Matthews, H. E., & Morris, M., 1983, *Ap. J.*, 267, 184
- Herbig, G. H. & Zappala, R. R., 1970, *Ap. J.*, 162, L15
- Herman M., Campargue A., Idrissi M.I. & Vander Auwera J., 2003, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 32, 921
- Herpin, F. & Cernicharo, J., 2000, *Ap. J.*, 530, L129
- Herpin F., Goicoechea J.R., Pardo J.R. & Cernicharo J., 2001, Proc. Symposium "The promise of the Herschel Space Observatory", 12-15 December 2000, Toledo (Spain), ESA SP-460, July 2001, eds. Pilbratt G.L., Cernicharo J., Heras A.M., Prusti T. y Harris R.
- Herpin F., Goicoechea J.R., Pardo J.R. & Cernicharo J., 2002, *Ap. J.*, 577, 961
- Herzberg, G., "Molecular Spectra and Molecular Structure: I. Spectra of Diatomic Molecules", Krieger Publishing Company, 1989, ISBN: 0-89464-268-5
- Herzberg, G., "Molecular Spectra and Molecular Structure: II. Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules", Krieger Publishing Company, 1989, ISBN: 0-89464-269-3
- Rothman, L. S. et al., The HITRAN Database, (USA: Atomic and Molecular Physics Division, Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics), <http://cfa-www.harvard.edu/hitran/>
- Hoeft, J., Lovas, F. J., Tiemann, E., Topping, T., 1969, *Z. Naturforsch.*, 24a, 1422
- Hollenbach, D. & Natta, A., 1995, *Ap. J.*, 455, 133
- Hollis, J. M., Lovas, F. J. & Jewell, P. R., *Ap. J.*, 540, L107

- Hollis, J. M., Lovas, F. J., Remijan, A. J., Jewell, P. R., Ilyushin, V. V. & Kleiner, I., *Ap. J.*, 643, L25
- Holmes, R., Jones, G. R., Pusat, N., & Tempest, W., 1962, *Trans. Faraday Soc.*, 58, 2342
- Holway, L. H., "Rarefied Gas Dynamics", Proceedings of the 4th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Ed. J. H. de Leeuw, Academic Press, 1965
- Howe, D. A., Millar, T. J., & Williams, D. A., 1992, *Monthly Notices of the RAS*, 255, 217
- Hoyle, F. & Wickramasinghe, N.C., "The theory of cosmic grains", Kluwer Academic Publishers, 1991, ISBN: 0-7923-1189-2
- Huber-Wälchli, P., Guthals, D. M., & Nibler, J. W., 1979, *Chem. Phys. Letters*, 67, 233
- Huggins, W., 1882, *Proc. R. Soc.*, 213, 233
- Huggins, P. J. & Glassgold, A. E., 1982, *Astron. J.*, 87, 1828
- Huggins, P.J. & Healy, A.P., 1986, *Ap. J.*, 304, 418
- Humphreys, E. M. L., "Astrophysical Masers and their Environments", Proceedings of the International Astronomical Union, IAU Symposium, Volume 242, pág. 471
- Huo, W. & Green, S., 1996, *J. Chem. Phys.*, 104, 7572
- Hutson, J. M. & Green, S., MOLSCAT version 14, Collaborative Computational Project No. 6 of the UK Science and Engineering Research Council, 1994
- Iben, I., 1967, *An. Rev. Astron. Astroph.*, 5, 571
- Iben, I. & Renzini, A., 1983, *An. Rev. Astron. Astroph.*, 21, 271
- Ignace, R., Cassinelli, J. P., & Bjorkman, J. E., 1996, *Ap. J.*, 459, 671
- Ivezić, Ž. & Elitzur, M., 1996, *Monthly Notices of the RAS*, 279, 1019
- Jacquemart D., Claveau C., Mandin J.-Y. & Dana V., 2001, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 69, 81
- Jennings, D. E., Bragg, S. L., & Brault, J. W., 1984, *Ap. J.*, 282, L85
- Johnson, D. R., Powell, F. X. & Kirchhoff, W. H., 1971, *J. Mol. Spec.*, 39, 136
- Jolicard, G. & Bonamy, J., 1983, *J. Chem. Phys.*, 79, 1248
- Jones, T. J., Bryja, C. O., Gehr, R. D., Harrison, T. E., Johnson, J. J., Klebe, D. I., & Lawrence, G. F., 1989, *Ap. J. Suppl. Ser.*, 74, 785
- Jonkman, R. M., Prangma, G. J., Ertas, I., Knaap, H. F. P., & Beenakker, J. J. M., 1968, *Physica*, 38, 441
- Judge, R. H. & Clouthier, D. J., 2001, *Comp. Phys. Comm.*, 135, 293
- Jura, M., 1994, *Ap. J.*, 434, 713
- Justtanont, K., Barlow, M. J., Tielens, A.G.G.M., Hollenbach, D., Latter, W. B., Liu, X.-W., Sylverter, R. J., Cox, P., N.-Q. Rieu, & Skinner, C. J., 2000, *Astron. Astroph.*, 360, 1117
- Justtanont, K., Bergman, P., Larsson, B., Olofsson, H., Schöier, F. L., Frisk, U., Hasegawa, T., Hjalmarsen, Å., Kwok, S., Olberg, M., et al., *Astron. Astroph.*, 2005, 439, 627
- Kabbadj Y., Herman M., Di Lonardo G., Fusina L. & Johns J.W., 1991, *J. Mol. Spec.*, 150, 535

- Kaler, J. B., 1978, *Ap. J.*, 220, 887
- Kastner, J. H. & Gatley, I., 2000, *ASP Conference Series*, 199, 355
- Kawaguchi, K., Kasai, Y., Ishikawa, S.-I., & Kaifu, N., 1995, *Pub. Astron. Soc. Japan*, 47, 853
- Keady, J. J., Hall D. N. B., & Ridgway S. T., 1988, *Ap. J.*, 326, 832
- Keady J. J. & Ridgway S. T., 1993, *Ap. J.*, 406, 199
- Khlifi, M., Paillous, P., Delpech, C., Nishio, M., Bruston, P., & Raulin, F., 1995, *J. Mol. Spec.*, 174, 116
- Knapp, G. R. & Morris, M., 1985, *Ap. J.*, 292, 640
- Knapp, G. R., Sandell, G., & Robson, E. I., 1993, *Ap. J. Suppl. Ser.*, 88, 173
- Kundu, P. K., "Fluid mechanics", San Diego Academic Press, 1990, ISBN: 0-124-28770-0
- Kwan, J. & Scoville, N., 1974, *Ap. J. Letters*, 194, L97
- Kowk S., 1975, *Ap. J.*, 198, 583
- Kwok, S., Purton, C. R., & FitzGerald, P. M., 1978, *Ap. J.*, 219, L125
- Kwok, S. & Feldman, P. A., 1981, *Ap. J.*, 247, L67
- Kwok, S. & Bignell, R. C., 1984, *Ap. J.*, 276, 544
- Kwok, S., 1993, *An. Rev. Astron. Astroph.*, 31, 63
- Lacy, J. H., Baas, F., Allamandola, L. J., Persson, S. E., McGregor, P. J., Lonsdale, C. J., Geballe, T. R., & van de Bult, C. E. P., 1984, *Ap. J.*, 276, 533
- Lacy, J. H., Richter, M. J., Greathouse, T. K., Jaffe, D. T. & Zhu, Q., 2002, *Pub. of the ASP*, 114, 153
- Lafont, S., Lucas, R., & Omont, A., 1982, *Astron. Astroph.*, 106, 201
- Le Bertre, T., 1992, *Astron. Astroph. Sup. Series*, 94, 377
- Le Bertre, T., 1993, *Astron. Astroph. Sup. Series*, 97, 729
- Leão, I., C., de Laverny, P., Mékarnia, D., de Medeiros, J. R., & Vandame, B., 2006, *Astron. Astroph.*, 455, 187
- Lee, C.-F. & Sahai, R., 2003, *Ap. J.*, 586, 319
- Levine, I. N., "Molecular spectroscopy", Wiley & Sons, Inc., 1975, ISBN: 0-471-53128-6
- Levy, D. H., 1980, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, 31, 197
- Lindqvist, M., Schöier, F. L., Lucas, R., & Olofsson, H., 2000, *Astron. Astroph.*, 361, 1036
- Lockett, P. & Elitzur, M., 1992, *Ap. J.*, 399, 704
- Long, D. A., "The Raman Effect: A Unified Treatment of the Theory of Raman Scattering by Molecules", Wiley & Sons, Ltd, ISBN: 0-470-84576-7
- Loup, C., Forveille, T., Omont, A., & Paul, J. F., 1993, *Astron. Astroph.*, 99, 291
- Lucas, R. & Cernicharo, J., 1989, *Astron. Astroph.*, 218, L20

- Lucas, R., Guélin, M., Kahane, C., Audinos, P., & Cernicharo, J., 1995, *Astroph. & Space Science*, 224, 293
- Luijks, G., Stolte, S., & Reuss, J., 1981, *Chem. Phys.*, 62, 217
- Maki, A., Quapp, W., Klee, S., Mellau, G. C., Albert, S., 1996, *J. Mol. Spec.*, 180, 323
- Maki, A., Mellau, G. C., Klee, S., Winnewisser, M., Quapp, W., 2000, *J. Mol. Spec.*, 202, 67
- Malathy Devi, V., Benner, D. C., Smith, M. A. H., Rinsland, C. P., Predoi-Cross, A., Sharpe, S. W., Sams, R. L., Boulet, C., & Bouanich, J. P., 2005, *J. Mol. Spec.*, 231, 66
- Mamon, G. A., Glassgold, A. E., & Huggins, P. J., 1988, *Ap. J.*, 328, 797
- Mandin, J.-Y., Jacquemart, D., Dana, V., Régalia-Jarlot, L., & Barbe, A., 2005, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 92, 23
- Marquardt, D. W., *J. Soc. Ind. App. Math.*, 11, 431
- Martín-Pintado, J., Bujarrabal, V., Bachiller, R., Gómez-González, J., & Planesas, P., 1988, *Astron. Astroph.*, 197, L15
- Martín-Pintado, J., Gaume, R., Bachiller, R., Johnston, K., 1993, *Ap. J.*, 419, 725
- Masso, H., Veryazov, V., Malmqvist P.-Å., Roos, B. O., & Senent, M. L., 2007, *J. Chem. Phys.*, 127, 154318
- Maté, B., Tejada, G., & Montero, S., 1998, *J. Chem. Phys.*, 108, 2676
- Maté, B., Graur, I. A., Elizarova, T., Chirokov, I., Tejada, G., Fernández, J. M., & Montero, S., 2001, *J. Fluid Mech.*, 426, 177
- Maté, B., Thibault, F., Ramos, A., Tejada, G., Fernández, J. M., & Montero, S., 2003, *J. Chem. Phys.*, 118, 10
- Maté, B., Thibault, F., Tejada, G., Fernández, J. M. & Montero, S., 2005, *J. Chem. Phys.*, 122, 064313
- Matsumura, K. & Tanaka, T., 1982, *J. Mol. Spec.*, 96, 219
- Matsumura, K. & Tanaka, T., 1984, *J. Mol. Spec.*, 108, 299
- Matsumura, K., Kawaguchi, K., McNaughton, D., & Bruget, D. N., 1993, *J. Mol. Spec.*, 158, 489
- Mauron, N. & Huggins, P. J., 1999, *Astron. Astroph.*, 349, 203
- Mauron, N. & Huggins, P. J., 2000, *Astron. Astroph.*, 359, 707
- McCabe, E. M., Smith, R. C., Clegg, R. E. S., 1979, *Nature*, 281, 263
- McCarthy, M. C., Gottlieb, C. A., Gupta, H., & Thaddeus, P., 2006, *Ap. J.*, 652, L141
- McGuire, P. & Kouri, D. J., 1974, *J. Chem. Phys.*, 60, 2488
- McNaughton, D. & Bruget, D. N., 1991, *J. Mol. Spec.*, 150, 620
- McNaughton, D. & Bruget, D. N., 1992, *J. Mol. Struc.*, 273, 11
- McNaughton, D. & Bruget, D. N., 1993, *J. Mol. Spec.*, 159, 340
- Men'shchikov, A. B., Balega, Y., Blöcker, T., Osterbart, R., & Weigelt, G., 2001, *Astron. Astroph.*, 368, 497

- Men'shchikov, A. B., Hofmann, K.-H., & Weigelt, G., 2002, *Astron. Astroph.*, 392, 921
- Miller, D. R., "Atomic and Molecular Beam Methods. Vol. I", Ed. G. Scoles, Oxford University Press, 1988
- Monnier, J. D., Geballe, T. R., & Danchi, W. C., 1998, *Ap. J.*, 502, 833
- Monnier, J. D., Danchi, W. C., Hale, D. S., Lipman, E. A., Tuthill, P. G., & Townes, C. H., 2000, *Ap. J.*, 543, 861
- Montero, S., "Polarizabilidad molecular y efecto Raman" (Cap. 1) en "Curso de espectroscopía Raman". Cursos de verano de la Universidad de Zaragoza, Ed. S. Montero, 1983, ISSN: 0210-9891
- Montero, S., "Espectroscopía Raman en jets supersónicos" (Cap. 7) en "Curso avanzado de Espectroscopía Molecular". Cursos de verano de la Universidad de Zaragoza, Ed. V. J. Herrero, 1995, ISBN: 84-606-2389-0
- Montero, S., Thibault, F., Tejeda, G. & Fernández, J. M., 2006, *J. Chem. Phys.*, 125, 124301
- Morris, M., Gilmore, W., Palmer, P., Turner, B. E., & Zuckerman, B., *Ap. J.*, 199, L47
- Mott-Smit, H. M., 1951, *Physical Review*, 82, 885
- Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Bizzocchi, L. & Winnewisser, G., 2000, *Z. Naturforsch.*, 55, 491
- Müller, H. S. P., McCarthy, M. C., Bizzocchi, L., Gupta, H., Esser, S., Lichau, H., Caris, M., Lewen, F., Hahn, J., et al., 2007, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 9, 1579
- Muntz, E. P., 1962, *Phys. Fluids*, 5, 80
- Muntz, E. P., "Rarefied Gas Dynamics", Proceedings of the 5th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, p. 1257, 1967
- Murakawa, K., Tamura, M., Suto, H., Itoh, Y., Hayashi, S. S., Oasa, Y., Nakajima, Y., Kaifu, N., Yates, J. A., et al., 2002, *Astron. Astroph.*, 395, L9
- Murphy, H. R., "The effects of source geometry on free jet expansions", Tesis doctoral, Universidad de California, San Diego, 1984
- Mutschke, H., Andersen, A. C., Clément, D., Henning, T., & Peiter, G., 1999, *Astron. Astroph.*, 345, 187
- Neri, R., García-Burillo, S., Guélin, M., Cernicharo, J., Guilloteau, S., & Lucas, R., 1992, *Astron. Astroph.*, 262, 544
- Neugebauer, G. & Leighton, R. B., 1969, "Two-Micron Sky Survey – a Preliminary Catalog" (NASA SP-3047 [Washington D.C.: Government Printing Office])
- Nordhaus, J., Blackman, E. G., & Frank, A., 2007, *Monthly Notices of the RAS*, 376, 599
- Nuth, J., A., Moseley, S., H., Silverberg, R., F., Goebel, J. H., & Moore, W. J., *Ap. J.*, 1985, 290, L41
- Olofsson, H., González Delgado, D., Kerschbaum, F., & Schöier, F. L., 2002, *Astron. Astroph.*, 391, 1053
- Owyoung, A., Patterson, C. W., & McDowell, R. S., 1978, *Chem. Phys. Letters*, 59, 156
- Ozeki, H., Hirao, T., Saito, S. & Yamamoto, S., 2004, *Ap. J.*, 617, 680
- Pardo, J. R., Cernicharo, J., González-Alfonso, E., & Bujarrabal, V., 1998, 329, 219

- Pardo, J. R., Cernicharo, J., & Serabyn, G., 2001, *IEEE Trans. Antennas Propagation*, 46, 1683
- Pardo, J. R., Alcolea, J., Bujarrabal, V., Colomer, F., del Romero, A., & de Vicente, P., 2004a, *Astron. Astroph.*, 424, 145
- Pardo, J. R., Cernicharo, J., Goicoechea, J. R., & Phillips, T. G., 2004b, *Ap. J.*, 615, 495
- Pardo, J. R., Cernicharo, J., & Goicoechea, J. R., 2005, *Ap. J.*, 628, 275
- Pardo, J. R. & Cernicharo, J., 2007, *Ap. J.*, 654, 978
- Parker, E. N., 1958, *Ap. J.*, 128, 664
- Pendleton, Y. J., Tielens, A. G. G. M., Tokunaga, A. T., 1999, *Ap. J.*, 513, 294
- Perrin, G., Ridgway, S. T., Mennesson, B., Cotton, W. D., Woillez, J., Verhoelst, T., Schuller, P., Coudé du Foresto, V., et al., 2004, *Astron. Astroph.*, 426, 279
- Pickett, H. M., 1991, *J. Mol. Spec.*, 148, 371, <http://spec.jpl.nasa.gov/ftp/pub/calpgm/>
- Pijpers F. P. & Hearn A. G., 1989a, *Astron. Astroph.*, 209, 198
- Pijpers F. P. & Habing H. J., 1989b, *Astron. Astroph.*, 215, 334
- Placzek, G., "Handbuch der Radiologie. Vol. 6", Ed. G. Marx, Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1934
- Prangma, G. J., Borsboom, L. J. M., Knaap, H. F. P., van den Meijdenberg, C. J. N., & Beenakker, J. J. M., 1972, *Physica*, 61, 527
- Rabitz, H. & Lam, S.-H., 1975, *J. Chem. Phys.*, 63, 3532
- Ramaswamy, R., Rabitz, H. & Green, S., 1977, *J. Chem. Phys.*, 66, 3021
- Ramos, A., Maté, B., Tejeda, G., Fernández, J. M., & Montero, S., 2000, *Physical Review E*, 62, 4940
- Ramos, A., "Procesos de intercambio energético en expansiones supersónicas: estudio por espectroscopía Raman", Tesis doctoral, Universidad Complutense de Madrid, 2001
- Ramos, A., Tejeda, G., Fernández, J. M., & Montero, S., 2002, *Physical Review A*, 66, 022702
- Randeniya, L. K. & Smith, M. A., 1990, *J. Chem. Phys.*, 93, 661
- Rebrov, A. K., 1985, "Rarefied Gas Dynamics" Vol. II, Proceedings of the 13th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Novosibirsk (1982), O. M. Belotserkovskii Ed. Plenum Press 1985, pág. 849, ISBN: 0306419327
- Reid, J. P., Thakkar, A. J., Barnes, P. W., Archibong, E. F., Quiney, H. M., Simpson, C. J. S. M., 1997, *J. Chem. Phys.*, 107, 2329
- Remijan, A. J., Wyrowski, F., Friedel, D. N., Meier, D. S., & Snyder, L. E., 2005, *Ap. J.*, 626, 233
- Ribicky, G. B., "Line Formation in the Presence of Magnetic Fields", Eds. Athay, R. G., House, L. L., Newkirk, G. Jr., High Altitude Observatory, Boulder, 1972, p. 145
- Ribicky, G. B., "Methods in Radiative Transfer", Ed. Kalkofen, W., Cambridge University Press, Cambridge, 1984, p. 21
- Ribicky, G. B. & Hummer, D. G., 1991, *Astron. Astroph.*, 245, 171

- Richichi, A., Chandrasekhar, T., & Leinert, C., 2003, *New Astronomy*, 8, 507
- Ridgway, S. T. & Keady, J. J., 1988, *Ap. J.*, 326, 843
- Robben, F. & Talbot, L., 1966, *Phys. Fluids*, 9, 644
- Rothman, L. S., Hawkins, R. L., Wattson, R. B., & Gamache, R. R., 1992, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 48, 5/6, 537
- Rothman, L. S., Barbe, A., Benner, D. C., Brown, L. R., Camy-Peyret, C., Carleer, M. R., Chance, K., Clerbaux, C., Dana, V., et al., 2003, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 82, 5
- Rothman, L. S., Jacquemart, D., Barbe, A., Benner, D. C., Birk, M., Brown, L. R., Carleer, M. R., Chackerian, C., Chance, K., Coudert, L. H., et al., 2005, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 96, 139
- Rouleau, F. & Martin, P. G., 1991, *Ap. J.*, 377, 526
- Sahai, R., Wootten, A., & Clegg, R. E. S., 1984, *Ap. J.*, 284, 144
- Sahai, R. & Trauger, J. T., 1998, *Ap. J.*, 116, 1357
- Sánchez-Contreras, C., Sahai, R., & Gil de Paz, A., 2002, *Ap. J.*, 578, 269
- Sánchez-Contreras, C., Bujarrabal, V., Castro-Carrizo, A., Alcolea, J., & Sargent, A., 2004a, *Ap. J.*, 617, 1142
- Sánchez-Contreras, C. & Sahai, R., 2004b, *Ap. J.*, 602, 960
- Sanz, M. E., McCarthy, M. C., & Thaddeus, P., 2003, *J. Chem. Phys.*, 119, 11715
- Saito, S. & Yamamoto, S., 1997, *J. Chem. Phys.*, 107, 1732
- Schilke, P. & Menten, K. M., 2003, *Ap. J.*, 583, 446
- Schmidt, G. D. & Cohen, M., 1981, *Ap. J.*, 246, 444
- Schöier, F. L. & Olofsson, H., 2001, *Astron. Astroph.*, 368, 969
- Schöier, F. L., Olofsson, H., & Lundgren, A. A., 2006, *Astron. Astroph.*, 454, 247
- Schöier, F. L., Fong, D., Olofsson, H., Zhang, Q., & Patel, N., 2006, *Ap. J.*, 649, 965
- Sharafutdinov, R. G. & Skovorodko, P. A., "Rarefied Gas Dynamics", Proceedings of the 12th International Symposium of Rarefied Gas Dynamics, Ed. S. S. Fisher, 1981, pág. 754, ISBN: 0915928515
- Sharafutdinov, R. G., Belikov, A. E., et al., 1996, *Chem. Phys.*, 207, 193
- Shindo, F., Bénilan, Y., Chaquin, P., Guillemin, J.-C., Jolly, A., & Raulin, F., 2001, *J. Mol. Spec.*, 210, 191
- Shindo, F., Bénilan, Y., Guillemin, J.-C., Chaquin, P., Jolly, A., & Raulin, Fr., 2003, *Plan. & Space Science*, 51, 9
- Sigrist, M. W., "Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry", Ed. J. C. Lindon, G. E. Tranter & J. L. Holmes, Elsevier, 2000, ISBN: 0-12-226680-3
- Silvera, I. F. & Tommasini, F., 1976, *Physical Review Letters*, 37, 136
- Sitz, G. O. & Farrow, R. L., 1990, *J. Chem. Phys.*, 93, 7883

- Skinner, C. J., Justtanont, K., Tielens A. G. G. M., Betz, A. L., Boreiko, R. T., & Baas, F., 1999, *Monthly Notices of the RAS*, 302, 293
- Snider, R. F., 1960, *J. Chem. Phys.*, 32, 1051
- Sobolev, V. V., "Theoretical Astrophysics", ed. V. A. Ambartsumyan, Pergamon Press, Ltd., London, 1958, Chapter 29
- Sobolev, V. V., "Moving Envelopes of Stars", Harvard University Press, 1958
- Soker, N. & Livio, M., 1989, *Ap. J.*, 339, 268
- Sopka, R. J., Hildebrand, R., Jaffe, D. T., Gatley, I., Roellig, T., Werner, M., Jura, M., & Su-ckerman, B., 1985, *Ap. J.*, 294, 242
- Strekalov, M. L., 1995, *Mol. Phys.*, 86, 39
- Swinyard, B. M., Burgdorf, M. J., Clegg, P. E., Davis, G. R., Griffin, M. J., Gry, C., Leeks, S. J., Lim, T. L., Pezzuto, S. & Tommasi, E., 1998, *Proc. SPIE*, 3354, 888
- Kazuo Takayanagi, 1965, *Adv. At. Mol. Proc.*, 1, 149
- Tejeda, G., Maté, B., Fernández-Sánchez, J. M., & Montero, S., 1996, *Phys. Rev. Lett.*, 76, 1
- Tejeda, G., Fernández-Sánchez, J. M., & Montero, S., 1997, *App. Spec.*, 51, 265
- Tejeda, G., Thibault, F., Fernández, J. M., & Montero, S., 2008, *J. Chem. Phys.*, 128, 224308
- G. Tejeda, "Un espectrómetro Raman Dual de muy alta sensibilidad", Tesis doctoral, Uni-versidad Autónoma de Madrid, 1997
- Temkin, S., Thuet, J. M., Bonamy, L., Bonamy, J., & Robert, D., 1991, *Chem. Phys.*, 158, 89
- Thronson, H. A. Jr., 1981, *Ap. J.*, 248, 984
- Toto, J. L., Toto, T. T., de Melo, C. P., Kirtman, & Robins, K., 1996, *J. Chem. Phys.*, 104, 8586
- Townes, C. H. & Schawlow, A. L., "Microwave Spectroscopy", Dover Publications, Inc., New York, 1975, ISBN: 0-486-61798-X
- Trammel, S. R., 2000, *ASP Conference Series*, 199, 147
- Truong-Bach, Graham, D., & Nguyen-Q-Rieu, 1996, *Astron. Astroph.*, 312, 565
- Tsuji, T., 1973, *Astron. Astroph.*, 23, 411
- Turner, P. H., Halonen, L. & Mills, I. M., 1981, *J. Mol. Spec.*, 88, 402
- Tuthill, P. G., Monnier, J. D., Danchi, W. C., & López, B., 2000, *Ap. J.*, 543, 284
- Tuthill, P. G., Monnier, J. D., & Danchi, W. C., 2005, *Ap. J.*, 624, 352
- Valentini, J. J., 1980, *Chem. Phys. Letters*, 75, 590
- van der Tak, F. F. S., Black, J. H., Schöier, F. L., Jansen, D. J., van Dishoeck, E. F., 2007, *Astron. Astroph.*, 468, 627
- van der Avoird, A., Wormer, P. E. S. & Jansen, A. P. J., 1986, *J. Chem. Phys.*, 84, 1629
- Verner, D. A., Verner, E. M., & Ferland, G. J., 1996, *At. Data Nucl. Data Tables*, 64, 1
- Volk, K., 1992, *Ap. J. Suppl. Ser.*, 80, 347
- Waldmann, L., 1957, *Z. Naturforsch Teil A*, 12, 66

- Waldmann, L., "Handbook der Physik", Ed. S. Flügge, Springer-Verlag, Berlin, 1958
- Wang Chang, C. S., Uhlenbeck, G. E., & de Boer, J., "Studies in Statistical Mechanics", J. de Boer & G. E. Uhlenbeck (North-Holland, Amsterdam), 1964
- Ware, J. M. & Roberts, J. A., 1984, *J. Chem. Phys.*, 81, 1215
- Waters, L. B. F. M., Wealkens, C., & van Winckel, H., *Nature*, 391, 868
- Watson, J. K. G., 1967, *J. Chem. Phys.*, 46, 1935
- Watson, W. D. & Salpeter E.E., 1972, *Ap. J.*, 174, 321
- Weber, M. J., "Handbook of lasers", CRC Press, 2001, ISBN: 0-8493-3509-4
- Weigelt, G., Balega, Y., Blöcker, T., Fleischer, A. J., Osterbart, R., & Winters, J. M., 1998, *Astron. Astroph.*, 333, L51
- Weigelt, G., Balega, Y. Y., Blöcker, T., Hofmann, K.-H., Men'shchikov, A. B., & Winters, J. M., 2002, *Astron. Astroph.*, 392, 131
- Westbrook, W. E., Becklin, E. E., Merrill, K. M., Neugebauer, G., Schmidt, M., Willner, S. P., & Wynn-Williams, C. G., 1975, *Ap. J.*, 202, 407
- Wiedemann, G. R., Hinkle, K. H., Keady, J. J., Deming, D., & Jennings, D. E., 1991, *Ap. J.*, 382, 321
- Willis, D. R., Hamel, B. B., & Lin, J. T., *Phys. Fluids*, 15, 573
- Wlodarczak, G., Bocquet, R., Bauer, A. & Demaison, J., 1988, *J. Mol. Spec.*, 129, 371
- Woods, P. M., Millar, T. J., Herbst, E., & Zijlstra, A. A., 2003, *Astron. Astroph.*, 402, 189
- Woods, P. M., Nyman, L.-Å., Schöier, F. L., Zijlstra, A. A., Millar, T., & Olofsson, H., 2005, *Ap. J.*, 429, 977
- Wynn-Williams, G. G., 1977, *Monthly Notices of the RAS*, 181, 61
- Wyrowski, F., Schilke, P., Thorwirth, S., Menten, K. M., & Winnewisser, G., 2003, *Ap. J.*, 586, 344
- Young, K. H., Hunter, T. R., Wilner, D. J., Gurwell, M. A., Barret, J. W., Blundell, R., Christensen, R., Fong, D., Hirano, N., Ho, P. T. P., Liu, S. Y., et al., 2004, *Ap. J.*, 616, L51
- Zarur, G. & Rabitz, H., *J. Chem. Phys.*, 1974, 60, 2057
- Zuckerman, B., 1980, *An. Rev. Astron. Astroph.*, 18, 263

Artículos publicados, presentaciones orales y posters

Publicaciones en revistas internacionales con sistema de arbitraje

- J. P. Fonfría Expósito, M. Agúndez, B. Tercero, J. R. Pardo & J. Cernicharo, “High- J $v=0$ SiS Maser Emission in IRC+10216: A New Case of Infrared Overlaps”, 2006, *Ap. J.*, 646, L127.
- J. P. Fonfría, A. Ramos, F. Thibault, G. Tejeda, J. M. Fernández & S. Montero, “Inelastic collisions in molecular nitrogen at low temperature ($2 \leq T \leq 50$ K)”, 2007, *J. Chem. Phys.*, 127, 134305.
- J. P. Fonfría, J. Cernicharo, M. J. Richter & J. H. Lacy, “A Detailed Analysis of the Dust Formation Zone of IRC+10216 Derived from Mid-IR Bands of C_2H_2 and HCN”, 2008a, *Ap. J.*, 673, 445.
- M. Agúndez, J. P. Fonfría, J. Cernicharo, J. R. Pardo & M. Guélin, “Detection of circumstellar CH_2CHCN , CH_2CN , CH_3CCH and H_2CS ”, 2008, *Astron. Astroph.*, 479, 493.
- J. P. Fonfría, J. Cernicharo, M. J. Richter & J. H. Lacy, “ C_4H_2 , C_6H_2 , and C_8H_2 towards CRL618”, enviado a la revista *Ap. J.*

Publicaciones en actas de congresos internacionales

- J. P. Fonfría Expósito, J. Cernicharo, M. J. Richter & J. H. Lacy, 2006, “Physical and Chemical Conditions in the Dust Formation Zone of IRC+10216”, *IAU Symposium 231: Astrochemistry – Recent Successes and Current Challenges*, Cambridge, 548pp., Proceedings of the International Astronomical Union.

Ponencias y posters presentados en congresos internacionales

1. Presentación oral titulada “Modelization and study of a high spectral resolution survey of IRC+10216 in the mid infrared range” en el congreso “XXXIII Young European Radioastronomers Conference (YERAC)” organizado en Bonn (Alemania) por el Max Planck Institut für Radioastronomie (MPIfR).
2. Orador invitado (a cargo de J. Cernicharo) con presentación titulada “The Physical and Chemical Conditions in the Dust Formation Zone of IRC+10216” en el congreso “IAU Symposium 231: Astrochemistry – Recent Successes and Current Challenges” organizado en Asilomar (California, EEUU) por California Institute of Technology (CalTech).

3. Presentación del poster titulado “Physical and Chemical Conditions in the Dust Formation Zone of IRC+10216” durante el congreso “IAU Symposium 231: Astrochemistry – Recent Successes and Current Challenges” organizado en Asilomar (California, EEUU) por California Institute of Technology (CalTech).
4. Presentación de poster titulado “High- J $v = 0$ SiS Maser Emission in IRC+10216: A New Case of Infrared Overlaps” en el congreso “Science with ALMA: a New Era for Astrophysics” realizado en Madrid (España) y organizado por el Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja (DAMIR, CSIC) y por el Observatorio Astronómico Nacional (OAN).
5. Presentación oral titulada “The Dust Formation Zone of IRC+10216” en el *workshop* “The Large Millimeter Telescope: First-Light science and future surveys” celebrado en Santa María Tonantzintla (Puebla, México) y organizado por el Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica (INAOE) y la University of Massachusetts Amherst (UMASS).
6. Presentación de poster titulado “La envoltura interna de las estrellas evolucionadas. Determinación experimental de los coeficientes colisionales del N_2 a bajas temperaturas” en el XXII Congreso Nacional de Astronomía celebrado en México D.F. (México) y organizado por la Universidad Iberoamericana (UIA) y el Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ).

Charlas y seminarios

1. Seminario impartido en el Instituto de la Estructura de la Materia (IEM) perteneciente al Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) titulado “Astrofísica Molecular: del experimento de laboratorio a la observación del Universo”.
2. Seminario impartido en el Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja (DAMIR) titulado “Máseres de SiS en la envoltura circunestelar de la estrella AGB IRC+10216”.
3. Seminario impartido en el Instituto de Física de la Benemérita Universidad de Puebla (BUAP, Puebla) titulado “Cálculo del espectro teórico de moléculas de interés astrofísico”.

Parte III

Apéndices

Apéndice A

Desarrollos matemáticos sobre las envolturas internas de las estrellas evolucionadas

A.1. Derivación completa de la ecuación de transporte radiativo

Si estudiamos el comportamiento de la intensidad de radiación que incide en un entorno del punto \mathbf{r} en el seno de un gas, vemos que hay varias contribuciones producidas por emisión, absorción y dispersión de radiación (ver Figura 3.1). Podemos proponer la siguiente igualdad:

$$\begin{aligned} I_\nu(\mathbf{r} + d\mathbf{r}, \mathbf{u}) d\omega ds d\nu &= I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}) d\omega ds d\nu d\ell + dI_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}) d\omega ds d\nu d\ell \\ &= I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}) d\omega ds d\nu d\ell + \mathcal{E}_\nu^g(\mathbf{r}, \mathbf{u}) + \mathcal{S}_{\star \rightarrow \nu}^g(\mathbf{r}, \star \rightarrow \mathbf{u}) \\ &\quad + \mathcal{E}_\nu^d(\mathbf{r}, \mathbf{u}) + \mathcal{S}_{\star \rightarrow \nu}^d(\mathbf{r}, \star \rightarrow \mathbf{u}) - \mathcal{A}_\nu^g(\mathbf{r}, \mathbf{u}) \\ &\quad - \mathcal{S}_{\nu \rightarrow \star}^g(\mathbf{r}, \mathbf{u} \rightarrow \star) - \mathcal{A}_\nu^d(\mathbf{r}, \mathbf{u}) - \mathcal{S}_{\nu \rightarrow \star}^d(\mathbf{r}, \mathbf{u} \rightarrow \star) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

donde $\mathcal{E}_\nu^g(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ es la cantidad de energía con frecuencia ν emitida por el gas en un entorno del punto \mathbf{r} y en la dirección \mathbf{u} , $\mathcal{A}_\nu^g(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ es la cantidad de energía con frecuencia ν que se propaga en la dirección \mathbf{u} que es absorbida en esa misma región, $\mathcal{S}_{\star \rightarrow \nu}^g(\mathbf{r}, \star \rightarrow \mathbf{u})$ es la radiación con una frecuencia dada y que se propaga en una dirección determinada que es dispersada en la dirección \mathbf{u} y que adquiere una frecuencia ν , y $\mathcal{S}_{\nu \rightarrow \star}^g(\mathbf{r}, \mathbf{u} \rightarrow \star)$ es la cantidad de energía que, llevando una dirección \mathbf{u} , es dispersada hacia otra dirección y pasa de tener una frecuencia ν a tener otra distinta (las definiciones son las mismas para el polvo). Podemos expresar cada uno de esos términos del siguiente modo, no indicando la dependencia de las magnitudes en \mathbf{r} para aligerar la lectura:

$$\mathcal{A}_\nu^g(\mathbf{u}) = h\nu \sum_{i=1}^m B_{lu}^i I_\nu n_l \phi_{ul}^i (\nu - \nu_{ul}^i) d\omega ds d\nu d\ell \quad (\text{A.2})$$

$$\mathcal{E}_\nu^g(\mathbf{u}) = h\nu \sum_{i=1}^m (A_{ul}^i + n_u B_{ul}^i I_\nu) \phi_{ul}^i (\nu - \nu_{ul}^i) d\omega ds d\nu d\ell \quad (\text{A.3})$$

$$\mathcal{S}_{\star \rightarrow \nu}^g(\star \rightarrow \mathbf{u}) = \left[n \sum_{i=1}^m x_i \int_{4\pi} \int_0^\infty \sigma_{\nu' \rightarrow \nu, i}^{s, g}(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{u}) I_{\nu'}(\mathbf{v}) d\nu' d\omega_{\mathbf{v}} \right] d\omega ds d\nu d\ell \quad (\text{A.4})$$

$$\mathcal{S}_{\nu \rightarrow \star}^g(\mathbf{u} \rightarrow \star) = \left[n I_\nu \sum_{i=1}^m x_i \int_{4\pi} \int_0^\infty \sigma_{\nu \rightarrow \nu', i}^{s, g}(\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{v}) d\nu' d\omega_{\mathbf{v}} \right] d\omega ds d\nu d\ell \quad (\text{A.5})$$

$$\mathcal{A}_\nu^d(\mathbf{u}) = n_d \sum_{j=1}^p y_j \sigma_{\nu,j}^{a,d} d\omega ds dv d\ell \quad (\text{A.6})$$

$$\mathcal{E}_\nu^d(\mathbf{u}) = n_d S_\nu^d(T_d) \sum_{j=1}^p y_j \sigma_{\nu,j}^{a,d} d\omega ds dv d\ell \quad (\text{A.7})$$

$$\mathcal{J}_{\star \rightarrow \nu}^d(\star \rightarrow \mathbf{u}) = \left[n_d \sum_{j=1}^p y_j \int_{4\pi} \int_0^\infty \sigma_{\nu' \rightarrow \nu,j}^{s,d}(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{u}) I_{\nu'}(\mathbf{v}) dv' d\omega_{\mathbf{v}} \right] d\omega ds dv d\ell \quad (\text{A.8})$$

$$\mathcal{J}_{\nu \rightarrow \star}^d(\mathbf{u} \rightarrow \star) = \left[n_d I_\nu \sum_{j=1}^p y_j \int_{4\pi} \int_0^\infty \sigma_{\nu \rightarrow \nu',j}^{s,d}(\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{v}) dv' d\omega_{\mathbf{v}} \right] d\omega ds dv d\ell \quad (\text{A.9})$$

Las definiciones de las magnitudes que aparecen en las anteriores igualdades están expuestas en la Sección 3.1.1.

Escribiendo todo explícitamente y reduciendo,

$$\begin{aligned} \frac{dI_\nu}{d\ell} = & -h\nu \sum_{i=1}^m B_{lu}^i I_\nu n_l \phi_{ul}^i (\nu - \nu_{ul}^i) + h\nu \sum_{i=1}^m (A_{ul}^i + n_u B_{ul}^i I_\nu) \phi_{ul}^i (\nu - \nu_{ul}^i) \\ & + n \sum_{i=1}^m x_i \int_{4\pi} \int_0^\infty \sigma_{\nu' \rightarrow \nu,i}^{s,g}(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{u}) I_{\nu'}(\mathbf{v}) dv' d\omega_{\mathbf{v}} \\ & - n I_\nu \sum_{i=1}^m x_i \int_{4\pi} \int_0^\infty \sigma_{\nu \rightarrow \nu',i}^{s,g}(\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{v}) dv' d\omega_{\mathbf{v}} \\ & - n_d I_\nu \sum_{j=1}^p y_j \sigma_{\nu,j}^{a,d} + n_d \sum_{j=1}^p y_j \sigma_{\nu,j}^{a,d} B_\nu(T_d) \\ & - n_d I_\nu \sum_{j=1}^p y_j \int_{4\pi} \int_0^\infty \sigma_{\nu \rightarrow \nu',j}^{s,d}(\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{v}) dv' d\omega_{\mathbf{v}} \\ & + n_d \sum_{j=1}^p y_j \int_{4\pi} \int_0^\infty \sigma_{\nu' \rightarrow \nu,j}^{s,d}(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{u}) I_{\nu'}(\mathbf{v}) dv' d\omega_{\mathbf{v}} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

A.2. Resolución de la ecuación de transporte radiativo con dos funciones fuente

Resolvamos la ecuación de transferencia de radiación cuando tenemos dos funciones fuente distintas pero constantes.

La ecuación de transporte radiativo es:

$$\frac{dI_\nu}{ds} = -k_\nu I_\nu + \varepsilon_\nu \quad (\text{A.11})$$

donde ε_ν indica la emisión mientras que k_ν indica la absorción. En el caso de tener dos fuentes de opacidad y de emisión,

$$\frac{dI_\nu}{ds} = -(k_\nu^g + k_\nu^d) I_\nu + \varepsilon_\nu^g + \varepsilon_\nu^d \quad (\text{A.12})$$

donde k_ν^g y k_ν^d son las absorciones del gas y del polvo respectivamente y ε_ν^g y ε_ν^d son las emisividades del gas y del polvo, igualmente. Definamos la *opacidad total* como $k_\nu = k_\nu^g + k_\nu^d$. La ecuación quedaría de esta manera,

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = -I_\nu + \frac{\varepsilon_\nu^g + \varepsilon_\nu^d}{k_\nu} \quad (\text{A.13})$$

Reescribiendo y usando las funciones fuente S_ν^g y S_ν^d ,

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = -I_\nu + \frac{k_\nu^g}{k_\nu} S_\nu^g + \frac{k_\nu^d}{k_\nu} S_\nu^d \quad (\text{A.14})$$

Definamos la función $w_\nu = k_\nu^d/k_\nu$. Así queda,

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = -I_\nu + (1 - w_\nu) S_\nu^g + w_\nu S_\nu^d \quad (\text{A.15})$$

Definiendo una función fuente total $S_\nu = (1 - w_\nu) S_\nu^g + w_\nu S_\nu^d$, podemos resolver la ecuación de transferencia de radiación como si sólo tuviéramos una función fuente.

$$I_\nu(\tau_\nu) = I_\nu(0) e^{-\tau_\nu} + e^{-\tau_\nu} \int_0^{\tau_\nu} dt_\nu e^{t_\nu} S_\nu(t_\nu) \quad (\text{A.16})$$

Por lo tanto, la solución si esa función fuente es constante, es:

$$I_\nu(\tau_\nu) = I_\nu(0) e^{-\tau_\nu} + [(1 - w_\nu) S_\nu^g + w_\nu S_\nu^d] (1 - e^{-\tau_\nu}) \quad (\text{A.17})$$

A.3. Obtención de una expresión adecuada de la intensidad de línea en No ETL

La expresión de la intensidad de línea obtenida por la teoría de transferencia radiativa es la siguiente:

$$S_{lu} = \frac{h\nu_{lu}}{c} \frac{n_l}{N} \left(1 - \frac{g_l n_u}{g_u n_l} \right) B_{lu} \quad (\text{A.18})$$

donde N es la densidad numérica de moléculas, B_{lu} el coeficiente de Einstein de absorción estimulada del nivel *low* al nivel *up*, n_k son las poblaciones de los niveles y ν_{lu} la frecuencia de la transición.

Reescribiendo la anterior expresión en función de la fuerza de línea y el cuadrado del momento dipolar de la transición (reescritura de la fórmula encontrada en [Jacquemart et al. \(2001\)](#)),

$$S_{lu} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{g_l^S \nu_{lu}}{Z} \frac{1}{g_V} |R|^2 L(J, \ell) \frac{1}{g_l} \frac{n_l}{n_f} \left(1 - \frac{g_l n_u}{g_u n_l} \right) \quad (\text{A.19})$$

donde $1/4\pi\epsilon_0 = 10^{-36} \text{ erg cm}^3 \text{ D}^{-2}$, ν_{lu} es la frecuencia de la línea en cm^{-1} , g_l^S es la degeneración del nivel inferior debida al spin nuclear, $L(J, \ell)$ es la fuerza de línea, g_V es un factor que vale 2 para transiciones en las que tanto el nivel superior como el inferior están desdoblados por interacción entre el momento angular vibracional total y el momento angular total molecular y 1 para el resto¹, g_l es la degeneración total del nivel inferior, n_f la población del nivel fundamental y Z es la función de partición total de la molécula (incluido el spin nuclear).

Una vez obtenidas las poblaciones de los niveles (ya sea mediante la resolución de las ecuaciones de equilibrio estadístico o mediante la consideración de las temperaturas rotacional y vibracional), es posible el cálculo de la intensidad de la línea.

Podemos escribir n_j/n_i , si $E_j > E_i$ de este modo,

$$\frac{n_j}{n_i} = \frac{n_j}{n_{j-1}} \frac{n_{j-1}}{n_{j-2}} \dots \frac{n_{i+1}}{n_i} = x(j-1) \dots x(i) \quad (\text{A.20})$$

donde n_1 es la población del nivel fundamental y $x(i) = n_{i+1}/n_i$.

¹Este factor se coloca por convenio aunque hay autores para los que siempre vale 1. Como la mayor parte de los datos utilizados en este trabajo proceden de la base de datos HITRAN y los valores que en ella se exponen utilizan este convenio, nosotros haremos lo mismo.

Para el cálculo de la función de partición se usa el mismo método. Podemos expresarla como

$$Z = g_1 \frac{N}{n_1} \quad (\text{A.21})$$

donde g_1 es la degeneración del nivel fundamental, N la densidad numérica de moléculas y n_1 la población del nivel fundamental. Como N debe ser la suma de las poblaciones de todos los niveles,

$$Z = \frac{g_1}{n_1} \sum_{i=1}^m n_i \quad (\text{A.22})$$

donde m es el número máximo de niveles posibles.

$$Z = \frac{g_1}{n_1} \sum_{i=1}^m n_i = g_1 \sum_{i=1}^m \frac{n_i}{n_1} = g_1 \sum_{i=1}^m \frac{n_i}{n_{i-1}} \cdots \frac{n_2}{n_1} = g_1 \sum_{i=1}^m x(i-1) \cdots x(1) \quad (\text{A.23})$$

Con todo esto, podemos escribir la expresión de la intensidad de línea como

$$S_{lu} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{g_l^S \nu_{lu}}{Z} \frac{1}{g_v} |R|^2 L(J, \ell) \frac{1}{g_l} x(l-1) \cdots x(1) \left(1 - \frac{g_l}{g_u} x(u-1) \cdots x(l) \right) \quad (\text{A.24})$$

donde Z tiene la forma anteriormente escrita.

Reescribamos la anterior expresión para expresarla usando los números $[v]J$ y la paridad e o f . Sea el nivel energético i tal que podamos caracterizarlo mediante el par de números $[v]J$, expresando el número $[v]$ la ordenación de los niveles vibracionales en energías y siendo el número J el número cuántico rotacional en ese nivel vibracional $[v]$. Sea $n_{[v]Jp}$ la densidad numérica de moléculas de una especie en un nivel energético $[v]J$ con paridad p y $n_{[v']J'p'}$ la densidad numérica para un nivel de energía inferior $[v']J'$ con paridad p' . Calculemos como ejemplo el cociente entre poblaciones de dos niveles pertenecientes a niveles vibracionales con $\ell \neq 0$ y teniendo ambos niveles paridad e .

$$\begin{aligned} \frac{n_{[v]Je}}{n_{[v']J'e}} &= \frac{n_{[v]Je}}{n_{[v]J-1f}} \frac{n_{[v]J-1f}}{n_{[v]J-1e}} \cdots \frac{n_{[v]1e}}{n_{[v]0f}} \frac{n_{[v]0f}}{n_{[v]0e}} \frac{n_{[v]0e}}{n_{[v]-10e}} \cdots \frac{n_{[v]+10e}}{n_{[v']0e}} \\ &\quad \times \left[\frac{n_{[v']J'e}}{n_{[v']J'-1f}} \frac{n_{[v']J'-1f}}{n_{[v']J'-1e}} \cdots \frac{n_{[v']1e}}{n_{[v']0f}} \frac{n_{[v']0f}}{n_{[v']0e}} \right]^{-1} \\ &= x_{[v]J-1}^r x_{[v]J-1}^{ef} \cdots x_{[v]0}^r x_{[v]0}^{ef} x_{[v]-1}^v \cdots x_{[v']}^v \\ &\quad \times \left[x_{[v']J'-1}^r x_{[v']J'-1}^{ef} \cdots x_{[v']0}^r x_{[v']0}^{ef} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

donde $x_{[v]J}^r = n_{[v]J+1e}/n_{[v]Jf}$, $x_{[v]J}^{ef} = n_{[v]Jf}/n_{[v]Je}$ y $x_{[v]}^v = n_{[v]+10e}/n_{[v]0e}$.

En la anterior expresión encontramos términos referidos a niveles moleculares no existentes físicamente. En esa expresión están colocados para regularizar la estructura de niveles rotacionales y aligerar el código. Los niveles no existentes serán auxiliares no considerándose en cualquier proceso físico real. Utilizando las fracciones x y combinándolas adecuadamente se puede representar cualquier cociente de poblaciones mediante sus productos. Los niveles con $J = 0$ en cada nivel vibracional con $\ell \neq 0$ no tienen desdoblamiento por no haber interacción entre momentos angulares. Por lo tanto, es equivalente usar el nivel e que el f ; su fracción $x_{v0}^{ef} = 1$.

Siguiendo con el ejemplo desarrollado:

$$\begin{aligned}
 S_{[v']J'e[v]Je} &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{g_{[v']J'e}^S \nu_{[v']J'e[v]Je}}{Z} \frac{|R|^2 L(J, \ell)}{g_V g_{[v']J'e}} \frac{n_{[v']J'e}}{n_{10e}} \left(1 - \frac{g_{[v']J'e}}{g_{[v]Je}} \frac{n_{[v]Je}}{n_{[v']J'e}} \right) \\
 &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{g_{[v']J'e}^S \nu_{[v']J'e[v]Je}}{Z} \frac{1}{g_V} |R|^2 L(J, \ell) \\
 &\quad \times \frac{1}{g_{[v']J'e}} x_{[v']J'-1}^r x_{[v']J'-1}^{ef} \cdots x_{[v']0}^r x_{[v']0}^{ef} x_{[v']-1}^v \cdots x_{[1]}^v \\
 &\quad \times \left(1 - \frac{g_{[v']J'e}}{g_{[v]Je}} \frac{x_{[v]J-1}^r x_{[v]J-1}^{ef} \cdots x_{[v]0}^r x_{[v]0}^{ef}}{x_{[v']J'-1}^r x_{[v']J'-1}^{ef} \cdots x_{[v']0}^r x_{[v']0}^{ef}} x_{[v']-1}^v \cdots x_{[1]}^v \right)
 \end{aligned} \tag{A.26}$$

Usando esta manera de escribir las expresiones, podemos dar una fórmula para la función de partición:

$$Z = g_f \sum_{[v]Jp} \frac{n_{[v]Jp}}{n_f} = g_f \sum_{[v]Jp} \left(x_{[v]J}^{ef} \right) x_{[v]J-1}^r x_{[v]J}^{ef} \cdots x_{[v]0}^r x_{[v]0}^{ef} x_{[v]-1}^v \cdots x_{[1]}^v \tag{A.27}$$

donde $x_{[v]J}^{ef}$ está entre paréntesis porque sólo hay que añadirlo si $p = f$.

A.4. Cálculo del flujo observado

La radiación procedente de un cuerpo celeste extenso se puede formular matemáticamente del siguiente modo: sea e el flujo recibido (para agilizar la escritura supondremos luz monocromática) y sea I la intensidad de radiación emitida en la dirección de observación. La intensidad se mide en $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2} \text{Hz}^{-1} \text{sr}^{-1}$ mientras que el flujo e se mide en $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2} \text{Hz}^{-1}$. Esto es debido a que la intensidad es la energía emitida por unidad de tiempo, por unidad de superficie y por unidad de frecuencia en *en una dirección en particular*. Por contra, el flujo e es la energía recibida por unidad de tiempo, de superficie y de frecuencia independientemente de la dirección que lleve la radiación. Entonces,

$$de = I(\Omega) d\Omega \tag{A.28}$$

donde $d\Omega$ es el elemento de ángulo sólido que rodea a la dirección a lo largo de la cual se propaga la radiación I .

Supongamos ahora que nuestro receptor está apuntado a un punto determinado en la esfera celeste. Supongamos que por su construcción la capacidad que tiene de recolectar la energía del objeto observado depende de la dirección que forme la radiación incidente con la dirección de apuntado. Entonces deberemos añadir un término más a la anterior expresión que tenga en cuenta la sensibilidad de receptor dependiente de la dirección. De este modo:

$$de = I(\Omega) P(\Omega) d\Omega \tag{A.29}$$

donde $P(\Omega)$ es la función que nos habla de ese comportamiento del receptor y $(\Omega) \sim (\theta, \phi)$ son las coordenadas angulares que nos indican la dirección en la esfera celeste, tomando el eje y del sistema de coordenadas con origen en el centro de la esfera celeste en la dirección de observación y los ejes x y z perpendiculares a ella. Supongamos que el telescopio apunta al centro del objeto a observar y que este objeto tiene simetría cilíndrica en torno a la dirección de observación ($I(\theta, \phi) = I(\theta)$). Además, tengamos en cuenta que $d\Omega = dS/D^2$ para superficies orientadas en la dirección de observación y consideremos que θ es un arco de círculo máximo en la esfera celeste que parte de la posición del objeto en ésta y acaba en un punto cercano. Teniendo en cuenta que para ángulos pequeños $\text{tg } \theta \simeq \theta$, podemos escribir que $d\Omega = 2\pi\theta d\theta$. Con esto la expresión anterior queda:

$$de = I(\theta) P(\theta) 2\pi\theta d\theta \tag{A.30}$$

Ahora tratemos de estudiar la función $P(\theta)$. Esta función debe ser tal que en la dirección de observación ($\theta = 0$) valga 1 y en el resto de las direcciones ($\theta \neq 0$) tenga valores menores. Esta es una manera de decir que no existen pérdidas en la dirección de observación pero aparecen contribuciones en otras direcciones imposibles de suprimir. Para un telescopio ideal, esta función es una función de Airy aunque una función fácil de manejar y que es aproximadamente igual a la función de Airy es una gaussiana. En realidad, la función de Airy está compuesta por un lóbulo principal y muchos secundarios y poco intensos localizados en ciertas posiciones determinadas. Como la contribución de estos lóbulos secundarios es muy pequeña se puede despreciar, siendo la gaussiana una aproximación más que aceptable. Así pues, consideremos $P(\theta) = \exp(-\theta^2/\sigma^2)$, donde σ es la semianchura característica de la gaussiana.

Juntando todo lo anterior tenemos que:

$$de = I(\theta)e^{-\theta^2/\sigma^2} 2\pi\theta d\theta \quad (\text{A.31})$$

La energía recibida procedente de la región entre los ángulos θ_1 y θ_2 es,

$$e(\theta_1, \theta_2) = 2\pi \int_{\theta_1}^{\theta_2} I(\theta)e^{-\theta^2/\sigma^2} \theta d\theta \quad (\text{A.32})$$

Supongamos ahora que en un intervalo (θ_1, θ_2) podemos considerar que la intensidad del objeto celeste es constante con la variable θ . Entonces podremos sacar la función $I(\theta) \simeq I_0$ fuera de la integral.

$$e \simeq 2\pi I_0 \int_{\theta_1}^{\theta_2} e^{-\theta^2/\sigma^2} \theta d\theta = 2\pi I_0 \left. \frac{e^{-\theta^2/\sigma^2}}{-2/\sigma^2} \right|_{\theta_1}^{\theta_2} = \pi\sigma^2 I_0 \left(e^{-\theta_1^2/\sigma^2} - e^{-\theta_2^2/\sigma^2} \right) \quad (\text{A.33})$$

Según la discretización hecha sobre la envoltura circunestelar (ver Sección 3.3.2), ésta está dividida de tal manera que su proyección sobre la esfera celeste está formada por diferentes anillos emisores en los que se toma la intensidad emitida como constante.

Considerando una anchura del haz del telescopio Δ , la relación entre esta anchura y la σ usada anteriormente es $\Delta = 2\sigma\sqrt{\ln 2}$. Reescribiendo la última expresión en función de Δ tenemos,

$$e \simeq \frac{\pi}{4} \frac{1}{\ln 2} \Delta^2 I_0 \left(e^{-4 \ln 2 \theta_1^2 / \Delta^2} - e^{-4 \ln 2 \theta_2^2 / \Delta^2} \right) \quad (\text{A.34})$$

Usando el radio lineal en radios estelares (R_*) y escribiendo Δ en segundos de arco,

$$e \simeq \frac{\pi}{4} \frac{1}{\ln 2} \left(\frac{\Delta}{206265} \right)^2 I_0 \left(e^{-4 \ln 2 x_1^2 \alpha^2 / \Delta^2} - e^{-4 \ln 2 x_2^2 \alpha^2 / \Delta^2} \right) \quad (\text{A.35})$$

donde $\theta_i = x_i \alpha$. Con esto tenemos que:

$$e^t \simeq \frac{\pi}{4} \frac{1}{\ln 2} \left(\frac{\Delta}{206265} \right)^2 \sum_{i=1}^{n-1} I_i \left(e^{-4 \ln 2 x_i^2 \alpha^2 / \Delta^2} - e^{-4 \ln 2 x_{i+1}^2 \alpha^2 / \Delta^2} \right) \quad (\text{A.36})$$

siendo I_i la intensidad que sale por el anillo entre x_i y x_{i+1} .

A.5. Expresión de la sección eficaz de absorción de un grano de polvo en función de n y k

Como ya hemos visto, $Q_{abs} \propto \text{Im} \left[\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right]$, donde $m = n - ik$. Para poder implementar todo esto en el programa, hemos de escribirlo en función de n y k .

$$\begin{aligned} Q_{abs} &\propto -\text{Im} \left[\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right] = \text{Im} \left[\frac{(n - ik)^2 - 1}{(n - ik)^2 + 2} \right] \\ &= \text{Im} \left[\frac{n^2 - k^2 - 2ink - 1}{n^2 - k^2 - 2ink + 2} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

Multiplicando y dividiendo por el complejo conjugado del denominador,

$$\begin{aligned} Q_{abs} &= \text{Im} \left[\frac{(n^2 - k^2 - 2ink - 1)(n^2 - k^2 + 2ink + 2)}{(n^2 - k^2 + 2)^2 + 4n^2k^2} \right] \\ &= \text{Im} \left[\frac{(n^2 - k^2 - 1)(n^2 - k^2 + 2) + 4n^2k^2}{(n^2 - k^2 + 2)^2 + 4n^2k^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{2ink(n^2 - k^2 - 1 - n^2 + k^2 - 2)}{(n^2 - k^2 + 2)^2 + 4n^2k^2} \right] \\ &= \text{Im} \left[\frac{(n^2 - k^2 - 1)(n^2 - k^2 + 2) + 4n^2k^2 - 6ink}{(n^2 - k^2 + 2)^2 + 4n^2k^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Por lo tanto, la parte compleja de esa fracción será:

$$\text{Im} \left[\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right] = \frac{-6nk}{(n^2 - k^2 + 2)^2 + 4n^2k^2} \quad (\text{A.39})$$

Así pues,

$$Q_{abs} \propto \frac{6nk}{(n^2 - k^2 + 2)^2 + 4n^2k^2} \quad (\text{A.40})$$

A.6. Perfil de temperatura del polvo

Sea una envoltura de polvo con una simetría aleatoria en la que consideramos un grano de polvo con una sección eficaz de absorción $\sigma_\nu^{a,d}$ y una sección eficaz de emisión ε_ν en el punto \mathbf{r} . Supongamos también que el sistema es estacionario, lo que significa que a escalas de tiempo mucho mayores que las correspondientes a los procesos de emisión y absorción radiativa y mucho menores que el tiempo característico de evolución de la envoltura se cumple que el grano emite la misma energía que absorbe. En consecuencia, la temperatura del grano, T_d , se mantiene constante. Así pues, considerando que el grano radia como un cuerpo gris:

$$\int_0^\infty \sigma_\nu^{a,d} \int_{4\pi} I_\nu(\mathbf{u}, \mathbf{r}) d\omega d\nu = \int_0^\infty \varepsilon_\nu B_\nu(T_d(\mathbf{r})) d\nu \quad (\text{A.41})$$

donde $I_\nu(\mathbf{u})$ es la intensidad incidente en el punto \mathbf{r} según la dirección \mathbf{u} . Considerando el principio de microrreversibilidad, las secciones eficaces de absorción y emisión son iguales para los granos de polvo, es decir, $\varepsilon_\nu = \sigma_\nu^{a,d}$. Dando un paso más, podemos decir que $\sigma_\nu^{a,d} \simeq \sigma_g Q_0 \nu^p$ a *grosso modo*, siendo σ_g la sección eficaz geométrica, Q_0 una constante de escalado y p un número positivo que suele ser próximo a 1. Entonces,

$$\int_0^\infty 4\pi \bar{J}_\nu(\mathbf{r}) \nu^p d\nu \simeq \int_0^\infty \nu^p B_\nu(T_d(\mathbf{r})) d\nu \quad (\text{A.42})$$

donde $\bar{J}_\nu(\mathbf{r})$ es la intensidad media en el punto \mathbf{r} . Desarrollando el término de la derecha:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \nu^p B_\nu(T_d(\mathbf{r})) d\nu &= \frac{2h}{c^2} \int_0^\infty \nu^p \frac{\nu^{3+p}}{e^{h\nu/k_B T_d(\mathbf{r})} - 1} d\nu \\ &= \frac{2h}{c^2} \left(\frac{k_B T_d(\mathbf{r})}{h} \right)^{4+p} \int_0^\infty \frac{x^{3+p}}{e^x - 1} dx \\ &= \frac{2h}{c^2} \left(\frac{k_B T_d(\mathbf{r})}{h} \right)^{4+p} f(p) \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

En resumen,

$$\frac{2h}{c^2} \left(\frac{k_B T_d(\mathbf{r})}{h} \right)^{4+p} f(p) \simeq \int_0^\infty 4\pi \bar{J}_\nu(\mathbf{r}) \nu^p d\nu \quad (\text{A.44})$$

Despejando $T_d(\mathbf{r})$,

$$T_d(\mathbf{r}) \simeq \frac{h}{k_B} \left[\frac{c^2}{2hf(p)} \int_0^\infty 4\pi \bar{J}_\nu(\mathbf{r}) \nu^p d\nu \right]^{1/(4+p)} \quad (\text{A.45})$$

En el caso de una envoltura ópticamente delgada, se puede hacer la aproximación de que toda la radiación procede de la estrella y $4\pi \bar{J}_\nu(\mathbf{r}) \simeq L_\nu / 4\pi r^2$, con lo que:

$$\int_0^\infty 4\pi \bar{J}_\nu(\mathbf{r}) \nu^p d\nu \simeq \int_0^\infty \frac{L_\nu}{4\pi r^2} \nu^p d\nu = \frac{1}{4\pi r^2} \int_0^\infty L_\nu \nu^p d\nu = \frac{\mathcal{L}(p)}{4\pi r^2} \quad (\text{A.46})$$

Según esta expresión, la temperatura del polvo es:

$$T_d(\mathbf{r}) \simeq r^{-2/(4+p)} \frac{h}{k_B} \left[\frac{c^2 \mathcal{L}(p)}{8\pi h f(p)} \right]^{1/(4+p)} \quad (\text{A.47})$$

A.7. Densidad en función de la profundidad óptica de la CSE

Una manera interesante de obtener la densidad de granos de polvo es a través de la relación existente entre la profundidad óptica y la propia densidad. Sabemos que la dependencia espacial de la densidad para el caso que estamos considerando de una envoltura esféricamente simétrica es $n_d \propto r^{-2}$. Sin embargo, vamos a considerar que la densidad crece linealmente en la Región I, donde es posible que exista formación de granos de polvo. Además, para simular la eyección de la atmósfera de una estrella AGB en el estadio de PPN, vamos a suponer que la densidad tiene una discontinuidad en R_{d2} . Eso quiere decir que la función densidad que utilizaremos es:

$$n_d(r) = \begin{cases} n_0(r/R_* - 1)/(R_{d1}/R_* - 1) & \text{si } R_* \leq r < R_{d1}, \\ n_0 (R_{d1}/r)^2 & R_{d1} \leq r < R_{d2}, \\ n'_0 (R_{d2}/r)^2 & R_{d2} \leq r < R_{\text{ext}}. \end{cases} \quad (\text{A.48})$$

donde n_0 es la densidad en R_{d1} y n'_0 es la densidad en R_{d2} . Si la densidad es continua en R_{d2} , $n'_0/n_0 = (R_{d1}/R_{d2})^2$ mientras que si es discontinua, esa relación es distinta. Sean $\sigma_{\lambda_0, I}^{\text{a,d}}$, $\sigma_{\lambda_0, II}^{\text{a,d}}$ y $\sigma_{\lambda_0, III}^{\text{a,d}}$ las secciones eficaces de absorción de un grano de polvo en función de la longitud de onda en cada una de las Regiones de la envoltura I, II y III. Consideramos que la sección eficaz es igual para cualquier punto dentro de una misma región porque hemos supuesto que si hay formación de polvo, ésta ocurre en las zonas de aceleración. Por ello, si las propiedades del polvo cambian lo hacen en esas zonas manteniéndose constantes a distancias mayores siempre y cuando los granos no pasen por otra zona de aceleración.

Con esto, calculemos la profundidad óptica de la CSE entre la fotosfera y un radio externo, R_{ext} , necesario para delimitar la envoltura.

$$\begin{aligned}
 \tau_{\lambda_0} &= \int_{R_*}^{\infty} n_d(r) \sigma_{\lambda_0}^{a,d}(r) dr \simeq \int_{R_*}^{R_{\text{ext}}} n_d(r) \sigma_{\lambda_0}^{a,d}(r) dr = \int_{R_*}^{R_{d1}} n_d(r) \sigma_{\lambda_0, \text{I}}^{a,d} dr \\
 &\quad + \int_{R_{d1}}^{R_{d2}} n_d(r) \sigma_{\lambda_0, \text{II}}^{a,d} dr + \int_{R_{d2}}^{R_{\text{ext}}} n_d(r) \sigma_{\lambda_0, \text{III}}^{a,d} dr \\
 &= \sigma_{\lambda_0, \text{I}}^{a,d} n_0 \int_{R_*}^{R_{d1}} \frac{r/R_* - 1}{R_{d1}/R_* - 1} dr + \sigma_{\lambda_0, \text{II}}^{a,d} n_0 \int_{R_{d1}}^{R_{d2}} \left(\frac{R_{d1}}{r} \right)^2 dr \\
 &\quad + \sigma_{\lambda_0, \text{III}}^{a,d} n'_0 \int_{R_{d2}}^{R_{\text{ext}}} \left(\frac{R_{d2}}{r} \right)^2 dr \\
 &= n_0 R_{d1} \sigma_{\lambda_0, \text{II}}^{a,d} \left[\frac{1}{2} \frac{\sigma_{\lambda_0, \text{I}}^{a,d}}{\sigma_{\lambda_0, \text{II}}^{a,d}} \left(1 - \frac{R_*}{R_{d1}} \right) + \left(1 - \frac{R_{d1}}{R_{d2}} \right) + \frac{n'_0}{n_0} \frac{\sigma_{\lambda_0, \text{III}}^{a,d}}{\sigma_{\lambda_0, \text{II}}^{a,d}} \frac{R_{d2}}{R_{d1}} \left(1 - \frac{R_{d2}}{R_{\text{ext}}} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{A.49}$$

Puede llegar a ser útil el escribir este resultado en función de la profundidad óptica de las Regiones II y III, que son:

$$\begin{aligned}
 \tau_{\lambda_0, \text{II}} &= n_0 R_{d1} \sigma_{\lambda_0, \text{II}}^{a,d} \left(1 - \frac{R_{d1}}{R_{d2}} \right) \\
 \tau_{\lambda_0, \text{III}} &= n'_0 R_{d2} \sigma_{\lambda_0, \text{III}}^{a,d} \left(1 - \frac{R_{d2}}{R_{\text{ext}}} \right)
 \end{aligned} \tag{A.50}$$

y su cociente η ,

$$\eta = \frac{n'_0}{n_0} \frac{\sigma_{\lambda_0, \text{III}}^{a,d}}{\sigma_{\lambda_0, \text{II}}^{a,d}} \frac{R_{d2}}{R_{d1}} \frac{(1 - R_{d2}/R_{\text{ext}})}{(1 - R_{d1}/R_{d2})} \tag{A.51}$$

Entonces, la profundidad óptica para λ_0 es:

$$\tau_{\lambda_0} = n_0 R_{d1} \sigma_{\lambda_0, \text{II}}^{a,d} \left[\frac{1}{2} \frac{\sigma_{\lambda_0, \text{I}}^{a,d}}{\sigma_{\lambda_0, \text{II}}^{a,d}} \left(1 - \frac{R_*}{R_{d1}} \right) + (1 + \eta) \left(1 - \frac{R_{d1}}{R_{d2}} \right) \right] \tag{A.52}$$

A.8. Estudio de la absorción de los granos de polvo pequeños sobre la radiación del infrarrojo medio

La profundidad óptica de la CSE expresada en función de la densidad utilizando la ley de conservación del flujo de masa es:

$$\tau_{\lambda} = \frac{\dot{M}_d/m_g}{4\pi} \frac{\tilde{Q}_{\text{abs}}(\lambda)}{\lambda} \int_{R_*}^{R_{\text{ext}}} \frac{1}{r^2 v_d(r)} dr \tag{A.53}$$

Es posible separar la opacidad del polvo en dos partes: la correspondiente a la geometría propia de los granos y la asociada a su comportamiento electromagnético además de otros parámetros macroscópicos del sistema. El factor que tiene en cuenta la parte geométrica de los granos, $\tau_{\lambda, \text{geo}}$, es

$$\tau_{\lambda, \text{geo}} = \frac{\sigma_g 8\pi r_g}{m_g} \tag{A.54}$$

Considerando el polvo circunestelar como formado por granos de polvo esféricos con radio r_g , el valor de $\sigma_g = \pi r_g^2$ y $m_g = \rho_g 4/3 \pi r_g^3$. Entonces el factor geométrico de la opacidad del polvo vale:

$$\tau_{\lambda, \text{geo}} = \frac{\sigma_g 8\pi r_g}{m_g} = \frac{\pi r_g^2 8\pi r_g}{\rho_g \frac{4}{3} \pi r_g^3} = \frac{6\pi}{\rho_g} \tag{A.55}$$

El resultado sólo depende de la densidad del material del que está hecho el grano y no del tamaño si los granos son esféricos y de radios mucho menores que la longitud de onda de la radiación ($2\pi r_g \ll \lambda$). Cuando $\lambda \sim 2\pi r_g$ (o bien, $\lambda \lesssim 1 \mu\text{m}$ para granos con radio $r_g \simeq 0.05 \mu\text{m}$) la aproximación realizada sobre $\sigma_\lambda^{\text{a,d}}$ no es válida y la profundidad óptica depende del tamaño del grano.

A.9. Obtención aproximada del momento dipolar vibracional a partir de la opacidad de una banda molecular completa

Puede sernos útil el calcular una aproximación del momento dipolar de una transición vibracional a partir de la opacidad de una banda rovibracional completa. Para ello, partimos de la expresión de la intensidad de línea de la Eq. A.19, reescrita de manera más adecuada para nuestros fines. Para cada rama de la banda (P, Q y R) tenemos una expresión ligeramente distinta:

$$\begin{aligned} S_J^R &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{g_{lJ}^S \nu_J^R}{Z} \frac{1}{g_V} |R_J^R|^2 L^R(J, \ell) \frac{1}{g_{lJ}} \frac{n_{lJ}}{n_f} \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ+1}} \frac{n_{uJ+1}}{n_{lJ}}\right) \\ S_J^Q &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{g_{lJ}^S \nu_J^Q}{Z} \frac{1}{g_V} |R_J^Q|^2 L^Q(J, \ell) \frac{1}{g_{lJ}} \frac{n_{lJ}}{n_f} \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ}} \frac{n_{uJ}}{n_{lJ}}\right) \\ S_J^P &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{g_{lJ}^S \nu_J^P}{Z} \frac{1}{g_V} |R_J^P|^2 L^P(J, \ell) \frac{1}{g_{lJ}} \frac{n_{lJ}}{n_f} \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ-1}} \frac{n_{uJ-1}}{n_{lJ}}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

donde hemos elegido que $l \equiv [v]_{\text{inf}}$ y $u \equiv [v]_{\text{sup}}$ por conveniencia y que el número cuántico rotacional J está referido al nivel inferior de la transición.

La absorción total, S , de una banda genérica con las tres ramas es:

$$S = \sum_{J=0}^{\infty} S_J^R + \sum_{J=0}^{\infty} S_J^Q + \sum_{J=1}^{\infty} S_J^P \quad (\text{A.57})$$

Podemos escribir de manera algo más compacta la anterior expresión indicando claramente que $S_0^P = 0$ (o bien $\nu_0^P = 0$),

$$S = \sum_{J=0}^{\infty} \left(S_J^R + S_J^Q + S_J^P \right) \quad (\text{A.58})$$

Escribiendo las fórmulas completas en vez de S_J^R , S_J^Q y S_J^P , y sacando como factor común todos los términos posibles:

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{1}{Z g_V} \sum_{J=0}^{\infty} \frac{g_{lJ}^S n_{lJ}}{g_{lJ} n_f} \left\{ \nu_J^R |R_J^R|^2 L^R(J, \ell) \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ+1}} \frac{n_{uJ+1}}{n_{lJ}}\right) \right. \\ &\quad \left. + \nu_J^Q |R_J^Q|^2 L^Q(J, \ell) \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ}} \frac{n_{uJ}}{n_{lJ}}\right) + \nu_J^P |R_J^P|^2 L^P(J, \ell) \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ-1}} \frac{n_{uJ-1}}{n_{lJ}}\right) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.59})$$

Introduzcamos ahora la dependencia del momento dipolar con el número J usando los coeficientes de Herman-Wallis (pág. 45):

$$\begin{aligned} F^{\text{PR}}(m) &= F_J^{\text{PR}} = (1 + A_1^{\text{PR}} m + A_2^{\text{PR}} m^2)^2 \\ F^{\text{Q}}(m) &= F_J^{\text{Q}} = [1 + A_2^{\text{Q}} m(m+1)]^2 \end{aligned} \quad (\text{A.60})$$

siendo $m = J + 1$ para la banda R, $m = -J$ para la P y $m = J$ para la Q, y $|R_J^{\text{RQP}}|^2 = |R_0|^2 F^{\text{RQP}}(m)$. Añadiendo todo esto a la Eq. A.59:

$$S = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{|R_0|^2}{Zg_V} \sum_{J=0}^{\infty} \frac{g_{lJ}^S n_{lJ}}{g_{lJ} n_f} \left\{ \nu_J^R F_J^R L^R(J, \ell) \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ+1}} \frac{n_{uJ+1}}{n_{lJ}}\right) \right. \\ \left. + \nu_J^Q F_J^Q L^Q(J, \ell) \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ}} \frac{n_{uJ}}{n_{lJ}}\right) + \nu_J^P F_J^P L^P(J, \ell) \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ-1}} \frac{n_{uJ-1}}{n_{lJ}}\right) \right\} \quad (\text{A.61})$$

Ahora podemos despejar $|R_0|^2$:

$$|R_0|^2 = S \frac{4\pi\epsilon_0 3hc Z g_V}{8\pi^3} \left\{ \sum_{J=0}^{\infty} \frac{g_{lJ}^S n_{lJ}}{g_{lJ} n_f} \left[\nu_J^R F_J^R L^R(J, \ell) \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ+1}} \frac{n_{uJ+1}}{n_{lJ}}\right) \right. \right. \\ \left. \left. + \nu_J^Q F_J^Q L^Q(J, \ell) \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ}} \frac{n_{uJ}}{n_{lJ}}\right) + \nu_J^P F_J^P L^P(J, \ell) \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ-1}} \frac{n_{uJ-1}}{n_{lJ}}\right) \right] \right\}^{-1} \quad (\text{A.62})$$

Haciendo la aproximación de que los coeficientes de Herman-Wallis son nulos, es decir, $A_1^{\text{PR}} = A_2^{\text{PR}} = A_2^{\text{Q}} = 0$, queda que $F_J^R = F_J^Q = F_J^P = 1$:

$$|R_0|^2 \simeq S \frac{4\pi\epsilon_0 3hc Z g_V}{8\pi^3} \left\{ \sum_{J=0}^{\infty} \frac{g_{lJ}^S n_{lJ}}{g_{lJ} n_f} \left[\nu_J^R L^R(J, \ell) \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ+1}} \frac{n_{uJ+1}}{n_{lJ}}\right) \right. \right. \\ \left. \left. + \nu_J^Q L^Q(J, \ell) \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ}} \frac{n_{uJ}}{n_{lJ}}\right) + \nu_J^P L^P(J, \ell) \left(1 - \frac{g_{lJ}}{g_{uJ-1}} \frac{n_{uJ-1}}{n_{lJ}}\right) \right] \right\}^{-1} \quad (\text{A.63})$$

Particularizando la anterior expresión para el caso de un sistema en ETL a una temperatura T_K , tenemos que:

$$|R_0|^2 \simeq S \frac{4\pi\epsilon_0 3hc Z g_V}{8\pi^3} \left\{ \sum_{J=0}^{\infty} \frac{g_{lJ}^S}{g_f} e^{-\beta E_{lJ}/T_K} \left[\nu_J^R L^R(J, \ell) \left(1 - e^{-\beta \nu_J^R/T_K}\right) \right. \right. \\ \left. \left. + \nu_J^Q L^Q(J, \ell) \left(1 - e^{-\beta \nu_J^Q/T_K}\right) + \nu_J^P L^P(J, \ell) \left(1 - e^{-\beta \nu_J^P/T_K}\right) \right] \right\}^{-1} \quad (\text{A.64})$$

donde $\beta = hc/k_B$, estando h , k_B y c expresados en unidades cgs ($\beta \simeq 1.4388 \text{ cm K}$).

La anterior expresión nos permite estimar el momento dipolar vibracional de una banda molecular a partir únicamente de las frecuencias de esta banda, las energías de los niveles inferiores de las transiciones, la función de partición de la especie considerada, Z , y la opacidad experimental de la banda.

A.10. ¿Son similares los efectos de un arco y un anillo homogéneo en el flujo recibido de una estrella AGB?

Supongamos un sistema como el de la Figura 3.6 en el que hay un nódulo significativamente más denso que su entorno con anchura a , grosor g , que subtiende un ángulo sólido $\delta\Omega$ y que se expande con velocidad v_n , tiene por coordenadas el par (x, y) . Consideremos que el gas de este nódulo (*gas nodular*) se caracteriza por tener una profundidad óptica $\tau_{\nu,n}$ y una temperatura de excitación T_n , por lo que emite un flujo igual a $\delta\epsilon_{\nu,n}$. Supongamos que el gas de todas las demás regiones con el mismo par de coordenadas (x, y) (*gas esférico*), es decir, con diferente coordenada axial e igual distancia a la línea de mirada, se expande con una velocidad v_0 , tiene una profundidad óptica $\tau_{\nu,0}$ y una temperatura de excitación T_0 siendo flujo asociado $\delta\epsilon_{\nu,0}$. Es decir, todas las regiones anteriores (incluido el nódulo) forman un anillo con la misma anchura a que el nódulo y que subtiende un ángulo sólido Ω .

Entonces, es posible demostrar que la contribución de esta estructura al flujo observado es similar a la de un anillo homogéneo formado por un gas con profundidad óptica constante $\tau_{\nu,a}$, que se expande a una velocidad v_a , con la misma geometría que el sistema anterior, que ocupa el mismo espacio, con una temperatura T_a y que emite un flujo $\delta\varepsilon_{\nu,a}$ (*gas anular*), superpuesto a otro con la misma geometría y formado por gas esférico. Además, supongamos que sobre la parte trasera de esta región (tanto para el caso del anillo homogéneo como para el caso del nódulo) incide una intensidad de radiación I_ν y que el material que hay entre el anillo y el telescopio se caracteriza por tener una profundidad óptica τ_ν y emitir un flujo ε_ν .

Para ello definamos las funciones μ_i , μ_{ij} , $\delta\varepsilon_i$, \mathcal{A} y \mathcal{N} (a partir de ahora no indicaremos la dependencia con la frecuencia para agilizar la escritura):

$$\begin{aligned}\mu_i &= (Ie^{-\tau_i} + \delta\varepsilon_i) e^{-\tau} + \varepsilon, \quad i = 0, a, n \\ \mu_{ij} &= (Ie^{-\tau_i} e^{-\tau_j} + \delta\varepsilon_i + \delta\varepsilon_j) e^{-\tau} + \varepsilon, \quad i, j = 0, a, n; i \neq j \\ \delta\varepsilon_i &= S_i (1 - e^{-\tau_i}), \quad i = 0, a, n \\ \mathcal{A} &= \mu_{a0}\Omega \\ \mathcal{N} &= \mu_0 (\Omega - \delta\Omega) + \mu_n \delta\Omega\end{aligned}\tag{A.65}$$

donde μ_i y μ_{ij} son unas funciones auxiliares, $S_i = S_i(T_i)$ son las funciones fuente de los tres entornos y \mathcal{A} y \mathcal{N} son las contribuciones correspondientes al anillo homogéneo y al nódulo al flujo total emitido por la fuente.

Calculemos la diferencia de flujos $\mathcal{N} - \mathcal{A}$:

$$\mathcal{N} - \mathcal{A} = \mu_0 (\Omega - \delta\Omega) + \mu_n \delta\Omega - \mu_{a0}\Omega = (\mu_0 - \mu_{a0}) \Omega + (\mu_n - \mu_0) \delta\Omega\tag{A.66}$$

Escribamos explícitamente las diferencias $\mu_0 - \mu_{a0}$ y $\mu_n - \mu_0$:

$$\begin{aligned}\mu_0 - \mu_{a0} &= [Ie^{-\tau_0} (1 - e^{-\tau_a}) - \delta\varepsilon_a] e^{-\tau} \\ \mu_n - \mu_0 &= [I(e^{-\tau_n} - e^{-\tau_0}) + \delta\varepsilon_n - \delta\varepsilon_0] e^{-\tau}\end{aligned}\tag{A.67}$$

Por lo tanto, la Ec. A.66 queda del siguiente modo:

$$\mathcal{N} - \mathcal{A} = \left\{ [Ie^{-\tau_0} (1 - e^{-\tau_a}) - \delta\varepsilon_a] + [I(e^{-\tau_n} - e^{-\tau_0}) + \delta\varepsilon_n - \delta\varepsilon_0] \frac{\delta\Omega}{\Omega} \right\} e^{-\tau} \Omega\tag{A.68}$$

Con la anterior expresión se puede obtener la relación entre las profundidades ópticas τ_n , τ_0 y τ_a que hacen que el anillo homogéneo sea similar al que contiene el nódulo, imponiendo la condición $\mathcal{N} - \mathcal{A} = 0$, $\forall \nu$. Desarrollando esta ecuación tenemos que:

$$Ie^{-\tau_0} (1 - e^{-\tau_a}) - \delta\varepsilon_a = [I(e^{-\tau_0} - e^{-\tau_n}) + \delta\varepsilon_0 - \delta\varepsilon_n] \frac{\delta\Omega}{\Omega}\tag{A.69}$$

Sustituyendo $\delta\varepsilon_i$ por las expresiones de la Ec. A.65 y operando,

$$(Ie^{-\tau_0} - S_a) (1 - e^{-\tau_a}) = [I(e^{-\tau_0} - e^{-\tau_n}) + S_0 (1 - e^{-\tau_0}) - S_n (1 - e^{-\tau_n})] \frac{\delta\Omega}{\Omega}\tag{A.70}$$

Reescribiendo,

$$(I - S_n) e^{-\tau_n} + S_n - (S_a - Ie^{-\tau_0}) (1 - e^{-\tau_a}) \frac{\Omega}{\delta\Omega} = e^{-\tau_0} (I - S_0) + S_0\tag{A.71}$$

Se observa que esta expresión depende de las funciones fuente del gas en los diferentes entornos, lo cual es esperable puesto que todas las componentes consideradas están conectadas radiativamente. Además, incluso en el caso de que las temperaturas de las tres regiones fueran iguales, no podemos olvidar que estamos permitiendo que cada una tenga una velocidad de expansión distinta. Este hecho influye decisivamente en la forma de

las funciones fuente y la forma funcional del perfil de la profundidad óptica de las líneas moleculares.

El flujo emitido por los gases nodular y esférico de las regiones con coordenadas (x, y) se debe representar por dos funciones fuente y dos profundidades ópticas distintas emitidas por regiones que se expanden a dos velocidades diferentes. Esto supone que, para una única línea molecular, el espectro emitido por esta estructura da lugar a la misma línea a dos frecuencias distintas (y con intensidades también distintas). Es por ello por lo que hemos considerado que la estructura equivalente está formada por dos componentes gaseosas, que nos permiten tratar cada una de las líneas mencionadas anteriormente. Es, por tanto, conveniente suponer que la función fuente del anillo es la misma que la del nódulo ($S_a = S_n$, lo que implica que $T_a = T_n$ y $v_a = v_n$). De este modo,

$$(I - S_n) e^{-\tau_n} + S_n + (I e^{-\tau_0} - S_n) (1 - e^{-\tau_a}) \frac{\Omega}{\delta\Omega} = e^{-\tau_0} (I - S_0) + S_0 \quad (\text{A.72})$$

Esta igualdad sugiere que es posible encontrar el anillo. Es necesario, por otro lado, discutir esta expresión y sus implicaciones en los resultados de su uso.

A pesar de que la Ec. A.72 es una igualdad no hemos de olvidar que todos los términos dependen de las frecuencias y que representan volúmenes de gas que se expanden a velocidades distintas. Esto implica que si las velocidades de los gases esférico y nodular son muy diferentes, la opacidad relativa a una línea molecular dada en el gas esférico es nula (sin tener en cuenta el polvo) evaluada a la frecuencia correspondiente al centro de la línea del gas nodular (o anular). Por ello, $e^{-\tau_0} = 1$ y la Ec. A.72 toma la forma

$$(I - S_n) e^{-\tau_n} + S_n + (I - S_n) (1 - e^{-\tau_a}) \frac{\Omega}{\delta\Omega} = I \quad (\text{A.73})$$

o bien, operando,

$$1 - e^{-\tau_n} = (1 - e^{-\tau_a}) \frac{\Omega}{\delta\Omega}. \quad (\text{A.74})$$

En el caso de que tanto τ_n como $\tau_a \ll 1$, la correspondencia entre el nódulo y el anillo es prácticamente exacta y se puede obtener la relación entre las densidades de columna de ambas estructuras. Cuando no ocurre esto, la correspondencia no es exacta pero sí aproximada, existiendo para un nódulo con cualquier opacidad un anillo aproximadamente equivalente.

Si $\tau_0 \neq 0$ evaluado a la frecuencia del centro de línea del gas nodular pero siendo aproximadamente constante ($D = e^{-\tau_0} \simeq \text{cte}$, como en el caso de existir polvo), la Ec. A.72 se convierte en:

$$e^{-\tau_n} + (1 - e^{-\tau_a}) \frac{DI - S_n}{I - S_n} \frac{\Omega}{\delta\Omega} = \frac{DI - S_n + (1 - D) S_0}{I - S_n} \quad (\text{A.75})$$

donde la deferencia en la dependencia funcional de la frecuencia entre τ_n y τ_a procede únicamente de la I . Si la profundidad óptica de la componente esférica del anillo es muy pequeña (como es de esperar ya que la profundidad óptica del polvo total de las envolturas que veremos en esta Tesis es $\simeq 1$) $D \simeq 1$ con lo que obtenemos la Ec. A.74 de nuevo, en primera aproximación.

Pero en el caso de que las velocidades de expansión del nódulo y del gas esférico no sean muy distintas, la interacción entre estas componentes no puede despreciarse y no es posible simplificar la Ec. A.72. La relación existente entre τ_n y τ_a depende de τ_0 y de I . Por ello, en esta situación el nódulo y el anillo únicamente son parecidos porque el perfil de línea del gas nodular calculado mediante la Ec. A.72 no es gaussiano. Estas diferencias podrían ser vistas al calcular el perfil sintético de las perturbaciones producidas en el espectro por el nódulo y compararlas con las observadas. No obstante, dicho proceso es muy complicado debido al ruido existente en el espectro observado. En consecuencia, la asunción de que se puede representar un nódulo mediante un anillo equivalente es una aproximación aceptable y permite estimar las propiedades físicas de los nódulos observados.

Apéndice B

Desarrollos matemáticos sobre las tasas de transferencia colisional nivel a nivel a temperaturas pequeñas

B.1. Temperatura traslacional de un gas en régimen isentrópico ($T_t \lesssim 300$ K)

Es posible expresar la temperatura traslacional ($T_t \lesssim 300$ K) de un gas formado por moléculas ligeras en régimen isentrópico en función de las poblaciones rotacionales. La entropía total del gas, S_{Total} , es:

$$S_{\text{Total}} = S_t + S_r + S_v, \quad (\text{B.1})$$

donde S_t , S_r y S_v son las entropías traslacional, rotacional y vibracional. Cuando $T_t \lesssim 300$ K, los estados vibracionales excitados de las moléculas ligeras no son accesibles colisionalmente y $S_{\text{Total}} \simeq S_t + S_r$, donde

$$\begin{aligned} S_t &= S_t^0 + R \left[\frac{3}{2} \ln T_t - \ln n \right] \\ S_r &= S_r^0 + R \left[\ln Z + T_r \frac{\partial}{\partial T_r} \ln Z \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

En la zona de silencio de una expansión supersónica de un gas formado por moléculas ligeras, la condición de isentropía ($S_{\text{Total}} = \text{cte}$) implica que la entropía del proceso es igual en la precámara (condiciones de estancamiento) que en cualquier punto de la zona de silencio. Por lo tanto,

$$\begin{aligned} S_t^0 + R \left[\frac{3}{2} \ln T_t^0 - \ln n^0 \right] + S_r^0 + R \left\{ \ln Z^0 + T_r^0 \left[\frac{\partial}{\partial T_r} \ln Z \right]_0 \right\} = \\ S_t^0 + R \left[\frac{3}{2} \ln T_t - \ln n \right] + S_r^0 + R \left[\ln Z + T_r \frac{\partial}{\partial T_r} \ln Z \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Reduciendo esta expresión y reescribiéndola:

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \ln \frac{T_t}{T_t^0} &= \ln \frac{n}{n^0} + \ln \frac{Z^0}{Z} + T_r^0 \left[\frac{\partial}{\partial T_r} \ln Z \right]_0 - T_r \frac{\partial}{\partial T_r} \ln Z \\ &= \ln \frac{n}{n^0} + \ln \frac{Z^0}{Z} + \frac{T_r^0}{Z^0} \left[\frac{\partial Z}{\partial T_r} \right]_0 - \frac{T_r}{Z} \frac{\partial Z}{\partial T_r}. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Es posible escribir la derivada parcial $\partial Z/\partial T_r$ en función de las poblaciones rotacionales utilizando la aproximación del rotor rígido:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial Z}{\partial T_r} &= \frac{\partial}{\partial T_r} \sum_J g_J (2J+1) e^{-\beta B J(J+1)/T_r} \\
 &= \frac{1}{T_r} \sum_J g_J (2J+1) e^{-\beta B J(J+1)/T_r} \frac{\beta B J(J+1)}{T_r} \\
 &= \frac{Z}{T_r} \sum_J \underbrace{\frac{g_J (2J+1)}{Z}}_{P_J} e^{-\beta B J(J+1)/T_r} \underbrace{\frac{\beta B J(J+1)}{T_r}}_{-P_J Z/g_J(2J+1)} \\
 &= -\frac{Z}{T_r} \sum_J P_J \ln \frac{P_J Z}{g_J (2J+1)}.
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

Introduciendo este resultado en la Ec. B.4,

$$\begin{aligned}
 \frac{3}{2} \ln \frac{T_t}{T_t^0} &= \ln \frac{n}{n^0} + \ln \frac{Z^0}{Z} - \sum_J P_J^0 \ln \frac{P_J^0 Z^0}{g_J (2J+1)} + \sum_J P_J \ln \frac{P_J Z}{g_J (2J+1)} \\
 &= \ln \frac{n}{n^0} + \ln \frac{Z^0}{Z} - \sum_J P_J^0 \ln \frac{P_J^0}{g_J (2J+1)} + \sum_J P_J \ln \frac{P_J}{g_J (2J+1)} \\
 &\quad - \sum_J P_J^0 \ln Z^0 + \sum_J P_J \ln Z.
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

Como $\sum_J P_J = 1$, entonces $\sum_J P_J \ln Z = \ln Z \sum_J P_J = \ln Z$ y

$$\begin{aligned}
 \frac{3}{2} \ln \frac{T_t}{T_t^0} &= \ln \frac{n}{n^0} + \ln \frac{Z^0}{Z} - \sum_J P_J^0 \ln \frac{P_J^0}{g_J (2J+1)} + \sum_J P_J \ln \frac{P_J}{g_J (2J+1)} - \ln \frac{Z^0}{Z} \\
 &= \ln \frac{n}{n^0} - \sum_J P_J^0 \ln \frac{P_J^0}{g_J (2J+1)} + \sum_J P_J \ln \frac{P_J}{g_J (2J+1)} \\
 &= \ln \frac{n}{n^0} + \sum_J \ln \left[\frac{P_J}{g_J (2J+1)} \right]^{P_J} - \sum_J \ln \left[\frac{P_J^0}{g_J (2J+1)} \right]^{P_J^0}.
 \end{aligned} \tag{B.7}$$

Por último, despejando T_t (Montero et al., 2006),

$$T_t = T_t^0 \left\{ \frac{n}{n^0} \prod_J \frac{[P_J/g_J (2J+1)]^{P_J}}{[P_J^0/g_J (2J+1)]^{P_J^0}} \right\}^{2/3}. \tag{B.8}$$

B.2. La Ecuación de Waldmann-Snider y la Ecuación Maestra

En este Apéndice se demuestra que la Ecuación de Waldmann-Snider (Ec. WS) y la Ecuación Maestra (MEQ) están muy relacionadas, pudiéndose tomar la MEQ como una aproximación de la Ec. WS y usarse indistintamente para caracterizar un gas diluido bajo unas condiciones muy generales.

Hemos visto que la Ec. WS es (Waldmann, 1958):

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_i(\mathbf{v}, t) = C[f_i](\mathbf{v}, t) \tag{B.9}$$

con

$$\begin{aligned}
 C[f_i](\mathbf{v}, t) &= \sum_{jlm} \int d\mathbf{u} \int d\Omega g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\Omega, \mathbf{g}, \mathbf{g}') \times \\
 &\quad \left[f_l(\mathbf{v}', t) f_m(\mathbf{u}', t) \frac{(2i+1)(2j+1)}{(2l+1)(2m+1)} - f_i(\mathbf{v}, t) f_j(\mathbf{u}, t) \right], \tag{B.10}
 \end{aligned}$$

donde no se ha incluido la dependencia espacial para agilizar la escritura.

El miembro de la izquierda de la Ec. B.9 es la derivada material o sustancial de la función de distribución f , es decir, la derivada temporal de f_i estudiando el fluido en un sistema de referencia que se mueve con él. La Ec. B.9 se escribe de manera más compacta como sigue:

$$\frac{Df_i(\mathbf{v}, t)}{Dt} = C[f_i](\mathbf{v}, t), \quad (\text{B.11})$$

siendo $D/Dt = d/dt$ para un gas en estático.

Se define la población de moléculas en el estado rotacional i -ésimo y en el punto \mathbf{r} del gas, P_i (dependiente del tiempo en el caso más general), como:

$$P_i(t) = \frac{1}{n} \int d\mathbf{v} f_i(\mathbf{v}, t) \quad (\text{B.12})$$

habiendo considerado que la función de distribución $f_i(\mathbf{v})$ proporciona el número de moléculas en el estado rotacional i y con velocidad en el intervalo $(\mathbf{v}, \mathbf{v} + d\mathbf{v})$ en el tiempo t . Integrando en velocidades y dividiendo por n la Ec. B.11:

$$\frac{1}{n} \int d\mathbf{v} \frac{Df_i(\mathbf{v}, t)}{Dt} = \frac{1}{n} \int d\mathbf{v} C[f_i](\mathbf{v}, t) \quad (\text{B.13})$$

donde

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \int d\mathbf{v} C[f_i](\mathbf{v}, t) = & \frac{1}{n} \sum_{jlm} \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{u} \int d\Omega g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\Omega, \mathbf{g}, \mathbf{g}') \times \\ & \left[f_l(\mathbf{v}', t) f_m(\mathbf{u}', t) \frac{(2i+1)(2j+1)}{(2l+1)(2m+1)} - f_i(\mathbf{v}, t) f_j(\mathbf{u}, t) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

El miembro de la izquierda de la Ec. B.13 es, utilizando la definición de las poblaciones (Ec. B.12),

$$\frac{1}{n} \int d\mathbf{v} \frac{Df_i(\mathbf{v}, t)}{Dt} = \frac{DP_i}{Dt}. \quad (\text{B.15})$$

El Principio del balance detallado cuántico para moléculas con niveles no degenerados es (Wang Chang et al., 1964):

$$g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\Omega, \mathbf{g}, \mathbf{g}') d\mathbf{v} d\mathbf{u} = g' \sigma_{lm \rightarrow ij}(\Omega, \mathbf{g}', \mathbf{g}) d\mathbf{v}' d\mathbf{u}'. \quad (\text{B.16})$$

En el caso de niveles moleculares rotacionales (degenerados), la sección eficaz de colisión se calcula sumando en todos los niveles finales y promediando en los iniciales. Por lo tanto, en la Ec. B.16 se debe modificar para tener en cuenta todos los posibles procesos que se produzcan entre los subniveles magnéticos de los niveles rotacionales considerados. La nueva expresión para el Principio del balance detallado queda como:

$$(2i+1)(2j+1) g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\Omega, \mathbf{g}, \mathbf{g}') d\mathbf{v} d\mathbf{u} = (2l+1)(2m+1) g' \sigma_{lm \rightarrow ij}(\Omega, \mathbf{g}', \mathbf{g}) d\mathbf{v}' d\mathbf{u}', \quad (\text{B.17})$$

o bien,

$$g' \sigma_{lm \rightarrow ij}(\Omega, \mathbf{g}', \mathbf{g}) d\mathbf{v}' d\mathbf{u}' = \frac{(2i+1)(2j+1)}{(2l+1)(2m+1)} g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\Omega, \mathbf{g}, \mathbf{g}') d\mathbf{v} d\mathbf{u}. \quad (\text{B.18})$$

En consecuencia, la Ec. B.14 se puede reescribir más adecuadamente como

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \int d\mathbf{v} C[f_i](\mathbf{v}, t) = & \frac{1}{n} \sum_{jlm} \int d\mathbf{v}' \int d\mathbf{u}' \int d\Omega g' \sigma_{lm \rightarrow ij}(\Omega, \mathbf{g}', \mathbf{g}) f_l(\mathbf{v}', t) f_m(\mathbf{u}', t) \\ & - \frac{1}{n} \sum_{jlm} \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{u} \int d\Omega g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\Omega, \mathbf{g}, \mathbf{g}') f_i(\mathbf{v}, t) f_j(\mathbf{u}, t) \\ = & \frac{1}{n} \sum_{jlm} [S_{lm \rightarrow ij}(t) - S_{ij \rightarrow lm}(t)]. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Para realizar el siguiente paso de este desarrollo, es necesario hacer varios razonamientos y aproximaciones referidos a los sumandos $S_{ij \rightarrow lm}(t)$ y $S_{lm \rightarrow ij}(t)$:

1. Debido a que el eje de la colisión lo determinan las velocidades \mathbf{v} y \mathbf{u} , ni el producto $f_i(\mathbf{v}, t)f_j(\mathbf{u}, t)$ ni la velocidad relativa \mathbf{g} dependen de Ω en el sistema de referencia del centro de masas. Entonces,

$$\begin{aligned} S_{ij \rightarrow lm}(t) &= \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{u} f_i(\mathbf{v}, t) f_j(\mathbf{u}, t) g \int d\Omega \sigma_{ij \rightarrow lm}(\Omega, \mathbf{g}, \mathbf{g}') \\ &= \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{u} g f_i(\mathbf{v}, t) f_j(\mathbf{u}, t) \sigma_{ij \rightarrow lm}(\mathbf{g}, \mathbf{g}'), \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

donde $\sigma_{ij \rightarrow lm}(\mathbf{g}, \mathbf{g}') = \int d\Omega \sigma_{ij \rightarrow lm}(\Omega, \mathbf{g}, \mathbf{g}')$. La expresión correspondiente a los sumandos $S_{lm \rightarrow ij}(t)$ es similar, siendo necesario colocar los apóstrofes en los lugares correspondientes.

2. En la mayor parte de los casos, no es posible acceder a las expresiones de las secciones eficaces y la función de distribución del gas es desconocida. Sin embargo, en muchas ocasiones ésta es parecida a la de Maxwell. Es por ello que conviene aproximar las secciones eficaces de colisión por sus valores promediados suponiendo una *función de distribución maxwelliana*, $f_M(m, T; \mathbf{v}) = \frac{1}{2} (m/2\pi k_B T)^{3/2} \exp(-mv^2/2k_B T)$ (ver Apéndice B.3). De este modo se obtiene que

$$\begin{aligned} S_{ij \rightarrow lm}(t) &= \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{u} g f_i(\mathbf{v}, t) f_j(\mathbf{u}, t) \sigma_{ij \rightarrow lm}(\mathbf{g}, \mathbf{g}') \\ &\simeq \langle g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\mathbf{g}, \mathbf{g}') \rangle_{\text{Maxwell}} \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{u} f_i(\mathbf{v}, t) f_j(\mathbf{u}, t). \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Considerando la velocidad relativa, $\mathbf{g} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$, y la velocidad del centro de masas, $\mathbf{G} = (\mathbf{v} + \mathbf{u})/2$, se obtiene que $d\mathbf{v}d\mathbf{u} = d\mathbf{g}d\mathbf{G}$. Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \langle g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\mathbf{g}, \mathbf{g}') \rangle_{\text{Maxwell}} &= \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{u} f_M(m, T; \mathbf{v}) f_M(m, T; \mathbf{u}) g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\mathbf{g}, \mathbf{g}') \\ &= \int d\mathbf{g} \int d\mathbf{G} f_M(\mu, T; \mathbf{g}) f_M(M, T; \mathbf{G}) g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\mathbf{g}, \mathbf{g}'), \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

donde M es la masa total del sistema y μ su masa reducida. Como únicamente $f_M(M, T; \mathbf{G})$ depende de \mathbf{G} se puede integrar en esta variable obteniendo:

$$\langle g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\mathbf{g}, \mathbf{g}') \rangle_{\text{Maxwell}} = \int d\mathbf{g} f_M(\mu, T; \mathbf{g}) g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\mathbf{g}, \mathbf{g}') \quad (\text{B.23})$$

3. Finalmente, utilizando la definición de población (Ec. B.12),

$$S_{ij \rightarrow lm}(t) \simeq \langle g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\mathbf{g}, \mathbf{g}') \rangle_{\text{Maxwell}} n^2 P_i P_j. \quad (\text{B.24})$$

En resumen,

$$\frac{DP_i}{Dt} \simeq n \sum_{jlm} [-\langle g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\mathbf{g}, \mathbf{g}') \rangle_{\text{Maxwell}} P_i P_j + \langle g \sigma_{lm \rightarrow ij}(\mathbf{g}, \mathbf{g}') \rangle_{\text{Maxwell}} P_l P_m], \quad (\text{B.25})$$

que es posible reescribir como

$$\frac{DP_i}{Dt} \simeq n \sum_{jlm} [-k_{ij \rightarrow lm} P_i P_j + k_{lm \rightarrow ij} P_l P_m] \quad (\text{B.26})$$

definiendo $k_{ij \rightarrow lm} = \langle g \sigma_{ij \rightarrow lm}(\mathbf{g}, \mathbf{g}') \rangle_{\text{Maxwell}}$.

B.3. Relación tasas de transferencia-sección eficaz de colisión

Como hemos visto en el Apéndice B.2, las tasas de transferencia se toman como expresadas según la expresión siguiente:

$$k_{ij \rightarrow lm}(T) = \frac{\langle v \rangle}{(k_B T)^2} \int_{E_s}^{\infty} dE E \sigma_{ij \rightarrow lm}(E) e^{-E/k_B T}, \quad (\text{B.27})$$

donde E es la energía cinética colisional y v es la velocidad asociada¹. En este Apéndice veremos que esta expresión procede de promediar la sección eficaz de colisión utilizando la función de distribución de Maxwell (ver Apéndice B.2).

El promedio con la distribución de Maxwell del producto $v \sigma_{ij \rightarrow lm}$ es:

$$\begin{aligned} \langle v \sigma_{ij \rightarrow lm} \rangle &= N \int_0^{\infty} dv v^2 e^{-mv^2/2k_B T} \int d\Omega v \sigma_{ij \rightarrow lm}(\Omega, v) \\ &= N \int_0^{\infty} dv v^3 \sigma_{ij \rightarrow lm}(v) e^{-mv^2/2k_B T}, \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

siendo N el factor de normalización de la distribución ($N = \int_0^{\infty} dv v^2 e^{-mv^2/2k_B T}$) con valor $(4/\sqrt{\pi})(m/2k_B T)^{3/2}$ y $\sigma_{ij \rightarrow lm}(v) = \int d\Omega \sigma_{ij \rightarrow lm}(\Omega, v)$. Haciendo un cambio de variable de v a la energía colisional $E = mv^2/2$ la última integral se convierte en:

$$N \int_0^{\infty} \frac{dE}{m} \frac{2E}{m} e^{-E/k_B T} \sigma_{ij \rightarrow lm}(E) = N \frac{2}{m^2} \int_0^{\infty} dE E \sigma_{ij \rightarrow lm}(E) e^{-E/k_B T}, \quad (\text{B.29})$$

donde $\sigma_{ij \rightarrow lm}$ ahora depende de la energía y, aunque no hayamos cambiado el símbolo que la presenta, la función sí es distinta al ser la transformación $E \rightarrow v$ no lineal. Para reescribir la constante multiplicativa de forma más adecuada es necesario calcular la velocidad promedio.

$$\langle v \rangle = N \int_0^{\infty} dv v^2 v e^{-mv^2/2k_B T} = N \int_0^{\infty} dv v^3 e^{-mv^2/2k_B T} \quad (\text{B.30})$$

Cambiando la variable de integración de v a $x = v\sqrt{m/2k_B T}$,

$$N \int_0^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{m/2k_B T}} \frac{x^3}{(m/2k_B T)^{3/2}} e^{-x^2} = N \left(\frac{2k_B T}{m} \right)^2 \int_0^{\infty} dx x^3 e^{-x^2}. \quad (\text{B.31})$$

Esta última integral tiene solución analítica y vale $1/2$. Por lo tanto,

$$\langle v \rangle = \frac{1}{2} N \left(\frac{2k_B T}{m} \right)^2. \quad (\text{B.32})$$

Despejando N y sustituyendo en la constante multiplicativa de la Ec. B.29, obtenemos

$$N \frac{2}{m^2} = \frac{2}{m^2} \frac{2\langle v \rangle}{(2k_B T/m)^2} = \frac{\langle v \rangle}{(k_B T)^2}, \quad (\text{B.33})$$

que es lo que buscábamos.

La elección del límite inferior de la integral de la Ec. B.27 se justifica mediante la consideración lógica de que para energías de colisión menores que E_s la colisión es elástica y no produce transiciones en la estructura interna de las partículas en colisión. En realidad la modificación del límite inferior de la integral de 0 a E_s no es necesaria puesto que el comportamiento de las secciones eficaces de colisión por debajo de E_s son prácticamente cero creciendo bruscamente al alcanzar ese valor.

¹Es común llamar a esta velocidad v en la definición de las tasas de transferencia y g en los desarrollos relativos a la Ecuación de Boltzmann y a la Ecuación de Boltzmann generalizada (ver Apéndice B.2).

B.4. Tasas de transferencia calculadas, $k_{\mu\nu\rightarrow\rho\sigma}^{\text{down,cc}}$ **TABLA B.1.**– Tasas de transferencia calculadas, $k_{\mu\nu\rightarrow\rho\sigma}^{\text{down,cc}} (\times 10^{-20} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1})$

Proceso	$\Delta E/\beta B$	T_i (K)										
		50	40	28	22	18	14	10	8	6	4	2
06 \rightarrow 44	2	5379	5712	6144	6352	6460	6506	6427	6308	6104	5753	5088
43 \rightarrow 05	2	1252	1334	1416	1433	1427	1400	1352	1319	1279	1221	1127
70 \rightarrow 36	2	4208	4377	4330	4083	3788	3390	2965	2787	2632	2442	2107
55 \rightarrow 17	2	1662	1729	1778	1784	1781	1770	1742	1710	1652	1550	1372
25 \rightarrow 43	4	6975	7201	7354	7308	7180	6925	6492	6199	5841	5375	4684
63 \rightarrow 45	4	5454	5476	5223	4902	4594	4225	3852	3685	3519	3308	3226
30 \rightarrow 12	4	9071	9764	10824	11481	11968	12470	12887	12970	12843	12297	10975
41 \rightarrow 23	4	8277	8750	9334	9579	9680	9670	9432	9157	8714	8030	6931
20 \rightarrow 00	6	1146	1211	1328	1410	1477	1553	1633	1667	1682	1655	1538
21 \rightarrow 01	6	3343	3471	3674	3802	3893	3978	4025	4013	3955	3817	3530
22 \rightarrow 02	6	2881	3037	3249	3353	3411	3444	3419	3364	3261	3087	2796
23 \rightarrow 03	6	2771	2818	2889	2935	2967	2992	2990	2965	2906	2780	2505
24 \rightarrow 04	6	3451	3573	3699	3741	3705	3638	3502	3398	3263	3080	2795
25 \rightarrow 05	6	2080	1996	1836	1740	1676	1611	1536	1488	1427	1341	1190
26 \rightarrow 06	6	2337	2320	2261	2218	2182	2136	2064	2013	1949	1867	1739
27 \rightarrow 07	6	1492	1454	1356	1301	1277	1272	1285	1283	1252	1174	1028
45 \rightarrow 61	6	2349	2490	2656	2745	2821	2923	3045	3072	2988	2622	1896
07 \rightarrow 45	6	6094	6323	6240	5890	5481	4933	4342	4082	3841	3539	3034
04 \rightarrow 22	8	7161	7686	8541	9003	9362	9722	10013	10061	9941	9481	8371
50 \rightarrow 14	8	3923	4242	4644	4829	4931	5007	5050	5049	5012	4883	4445
15 \rightarrow 33	8	6302	6647	7100	7310	7412	7443	7330	7174	6910	6488	5794
61 \rightarrow 25	8	4602	5019	5581	5844	5956	5924	5566	5184	4654	4041	3331
62 \rightarrow 44	8	4742	4834	4916	4943	4941	4892	4732	4580	4356	4046	3608
72 \rightarrow 36	8	4167	4471	4683	4575	4315	3809	3013	2560	2165	1881	1611
30 \rightarrow 10	10	1923	2072	2304	2439	2530	2614	2674	2683	2663	2585	2369
31 \rightarrow 11	10	4132	4341	4616	4738	4792	4795	4700	4592	4428	4199	3870
32 \rightarrow 12	10	5333	5503	5735	5863	5941	5991	5971	5909	5786	5560	5123
33 \rightarrow 13	10	4575	4815	5132	5273	5343	5378	5267	5149	4953	4639	4135
34 \rightarrow 14	10	4396	4462	4483	4465	4436	4382	4286	4212	4109	3948	3658
35 \rightarrow 15	10	6854	6007	6112	6088	6010	5850	5570	5371	5122	4805	4353
36 \rightarrow 16	10	3191	3257	3129	3037	2946	2820	2639	2521	2381	2228	2330
41 \rightarrow 03	10	1491	1601	1743	1807	1836	1840	1790	1729	1630	1477	1233
56 \rightarrow 72	10	2581	2853	3278	3568	3813	4105	4391	4435	4213	3340	1785
22 \rightarrow 00	12	315	329	347	354	357	356	351	345	335	320	288
05 \rightarrow 23	12	6017	6153	6360	6515	6645	6790	6928	6976	6984	6897	6524
61 \rightarrow 43	12	5856	6004	6075	6059	6022	5943	5738	5535	5233	4824	4209
70 \rightarrow 16	12	1928	2001	1972	1852	1711	1521	1315	1224	1139	1027	844
72 \rightarrow 54	12	4783	5014	5130	5014	4800	4411	3809	3456	3125	2839	2495
04 \rightarrow 02	14	3264	3407	3663	3821	3937	4053	4142	4150	4097	3918	3510
14 \rightarrow 12	14	3865	4083	4405	4575	4670	4715	4650	4542	4353	4046	3551
24 \rightarrow 22	14	4718	4927	5161	5234	5235	5169	4994	4848	4650	4378	3963
34 \rightarrow 32	14	5012	5209	5412	5482	5501	5482	5400	5321	5198	4991	4595
44 \rightarrow 42	14	4539	4698	4876	4947	4974	4966	4890	4806	4667	4440	4047
54 \rightarrow 52	14	3998	4113	4207	4226	4218	4181	4089	4003	3861	3601	3109
64 \rightarrow 62	14	5932	6056	6019	5878	5714	5481	5157	4946	4683	4339	3810
61 \rightarrow 05	14	894	980	1098	1154	1179	1174	1100	1020	910	785	648
52 \rightarrow 14	14	2763	2956	3171	3234	3232	3168	3014	2891	2728	2498	2151
23 \rightarrow 01	16	1045	1073	1112	1133	1145	1152	1144	1129	1101	1050	953
06 \rightarrow 24	16	7547	7876	8309	8520	8627	8663	8544	8373	8064	7509	6504
65 \rightarrow 07	16	516	576	670	734	787	850	911	920	874	694	378
17 \rightarrow 35	16	6706	6990	7315	7480	7585	7665	7650	7558	7362	7012	6316

05 → 03	18	1508	1551	1609	1637	1652	1664	1669	1667	1658	1624	1497
15 → 13	18	6003	6288	6651	6821	6905	6930	6824	6679	6436	6055	5440
25 → 23	18	3986	4208	4502	4632	4691	4705	4633	4538	4384	4150	3788
35 → 33	18	4569	4721	4839	4840	4799	4704	4532	4408	4249	4043	3744
45 → 43	18	4368	4562	4808	4935	5013	5069	5064	5008	4863	4523	3882
55 → 53	18	4087	4193	4235	4211	4168	4093	3964	3863	3719	3511	3201
65 → 63	18	3703	3815	3825	3799	3747	3677	3585	3519	3405	3176	2903
63 → 25	18	2605	2702	2729	2726	2677	2599	2493	2426	2341	2213	2184
72 → 16	18	1828	1970	2074	2031	1916	1688	1327	1123	949	827	709
33 → 11	20	964	1013	1070	1090	1093	1082	1045	1009	956	880	772
04 → 00	20	267	288	315	330	339	347	352	351	343	322	277
14 → 10	20	700	739	787	806	813	809	782	752	705	631	518
24 → 20	20	1817	1908	2009	2036	2032	1997	1914	1848	1763	1652	1486
34 → 30	20	1026	1059	1081	1075	1061	1034	990	959	917	851	733
44 → 40	20	809	848	901	927	940	944	927	907	873	817	718
54 → 50	20	882	914	935	938	941	948	958	953	917	803	579
64 → 60	20	1124	1152	1153	1130	1103	1065	1010	972	919	842	718
07 → 25	20	3217	3341	3442	3452	3429	3373	3275	3206	3106	2938	2625
06 → 04	22	2061	2093	2102	2089	2071	2043	1998	1961	1903	1803	1630
16 → 14	22	2814	2923	3081	3150	3194	3190	3112	3030	2911	2748	2494
26 → 24	22	6337	6601	6857	6920	6908	6818	6590	6394	6118	5727	5117
36 → 34	22	3801	3893	3939	3914	3865	3770	3602	3472	3292	3031	2889
46 → 44	22	3820	3918	3936	3877	3797	3674	3489	3361	3196	2974	2645
56 → 54	22	3630	3729	3729	3659	3581	3475	3343	3270	3187	3092	3106
50 → 12	22	1868	2006	2198	2304	2376	2449	2517	2542	2549	2505	2306
63 → 05	24	535	558	567	556	541	520	497	485	469	443	429
52 → 03	24	871	919	977	997	1000	988	955	926	885	826	731
70 → 34	24	3454	3563	3491	3279	3036	2712	2355	2193	2034	1825	1473
34 → 12	24	2128	2229	2327	2350	2346	2316	2251	2199	2127	2014	1804
24 → 00	26	152	159	165	167	166	161	153	146	137	125	109
61 → 23	26	2926	3158	3463	3601	3655	3622	3398	3169	2859	2513	2132
70 → 50	26	995	1000	1018	1043	1067	1089	1088	1068	1029	965	846
71 → 51	26	3727	3866	3986	4015	4018	4002	3959	3919	3855	3749	3522
72 → 52	26	2963	3053	3106	3097	3066	3000	2875	2782	2664	2515	2308
26 → 04	28	1178	1228	1278	1294	1294	1278	1232	1191	1130	1045	918
44 → 22	28	1189	1240	1297	1317	1323	1316	1286	1254	1206	1128	1002
05 → 01	28	553	580	620	649	673	701	733	750	763	768	742
15 → 11	28	1212	1286	1383	1429	1454	1466	1454	1431	1391	1325	1221
25 → 21	28	1582	1687	1820	1877	1901	1906	1873	1834	1770	1671	1503
35 → 31	28	3748	3904	4040	4053	4017	3923	3740	3602	3425	3196	2886
45 → 41	28	1969	2080	2214	2284	2337	2399	2459	2457	2374	2092	1543
55 → 51	28	1570	1629	1680	1693	1695	1686	1654	1618	1556	1455	1300
65 → 61	28	1578	1689	1828	1907	1969	2041	2113	2125	2068	1832	1410
43 → 01	30	431	445	451	446	437	422	400	387	370	346	301
06 → 22	30	1836	1943	2087	2163	2210	2245	2247	2219	2152	2014	1750
27 → 43	30	3107	3310	3458	3405	3259	2967	2494	2215	1955	1734	1475
61 → 03	32	442	486	550	583	601	606	580	547	502	449	390
27 → 05	32	631	647	648	631	607	567	505	466	425	383	337
63 → 41	32	1603	1639	1645	1621	1587	1532	1447	1387	1311	1207	1143
54 → 32	32	2478	2570	2654	2688	2715	2751	2786	2773	2674	2367	1777
25 → 01	34	277	297	327	343	353	360	360	354	341	318	279
44 → 02	34	455	476	500	509	512	510	497	486	469	444	405
70 → 14	34	1169	1218	1218	1163	1093	993	876	818	758	677	545
17 → 33	34	1978	2077	2265	2283	2339	2391	2414	2395	2337	2222	2010
06 → 20	36	920	967	1026	1056	1076	1094	1108	1109	1097	1062	984
16 → 12	36	1272	1367	1508	1583	1623	1647	1642	1622	1580	1491	1309
26 → 22	36	1934	2033	2132	2155	2151	2119	2044	1981	1893	1765	1560
36 → 32	36	1926	2020	2152	2224	2264	2278	2223	2149	2028	1843	1713

46 → 42	36	4018	4136	4175	4121	4042	3917	3728	3597	3428	3209	2909
56 → 52	36	2204	2374	2608	2754	2870	3002	3117	3112	2955	2430	1545
55 → 33	36	1042	1065	1078	1077	1074	1066	1047	1027	993	939	857
45 → 03	38	503	528	556	572	585	602	620	622	600	520	361
35 → 11	38	746	777	801	799	787	762	715	682	639	586	515
07 → 23	38	1623	1670	1682	1653	1615	1559	1495	1464	1433	1389	1286
44 → 00	40	57	60	62	63	63	63	61	60	58	56	53
65 → 43	40	2127	2262	2437	2545	2635	2740	2840	2840	2711	2265	1505
72 → 14	40	1111	1188	1256	1253	1216	1134	991	905	823	755	681
60 → 00	42	114	119	126	131	134	138	141	142	142	138	127
61 → 01	42	235	248	264	272	277	279	277	272	263	246	218
62 → 02	42	688	721	752	759	756	743	713	689	655	607	539
63 → 03	42	378	394	412	419	421	418	405	393	373	345	338
64 → 04	42	796	820	828	818	802	777	738	711	673	623	554
65 → 05	42	398	426	460	478	492	507	519	517	494	424	307
45 → 21	42	1103	1143	1162	1178	1184	1198	1218	1214	1163	999	682
07 → 03	44	512	535	578	613	641	665	670	657	628	581	505
17 → 13	44	2036	2152	2297	2370	2415	2452	2466	2455	2424	2357	2193
27 → 23	44	1812	1888	1948	1947	1921	1857	1736	1650	1548	1428	1269
55 → 31	46	851	871	884	886	886	884	873	857	827	774	695
63 → 21	46	767	799	839	858	866	861	828	793	738	657	578
26 → 00	48	53	55	57	58	57	56	54	52	50	47	43
45 → 01	48	264	275	285	289	293	299	306	306	292	245	155
70 → 12	48	534	557	570	564	553	536	517	508	500	487	458
56 → 14	50	941	1013	1118	1187	1246	1317	1384	1388	1317	1060	615
27 → 03	50	355	370	380	376	366	346	311	289	265	238	203
46 → 22	50	1022	1041	1027	996	964	919	862	826	782	729	662
63 → 01	52	115	120	128	133	137	139	136	132	125	114	110
07 → 01	54	182	198	235	267	294	323	346	351	349	344	336
17 → 11	54	479	527	561	576	584	590	592	592	590	586	566
27 → 21	54	615	641	669	681	688	690	681	666	640	594	512
65 → 23	54	1263	1372	1540	1657	1757	1877	1995	2007	1898	1490	754
46 → 02	56	417	424	417	404	390	371	347	331	312	287	254
55 → 11	56	225	229	229	228	226	224	220	214	205	188	162
27 → 01	60	110	114	118	120	121	121	120	117	113	104	89
65 → 03	60	236	251	272	284	294	306	316	316	301	250	162
46 → 00	62	40	40	39	37	35	32	30	28	26	23	20
65 → 21	64	643	699	783	843	895	957	1019	1024	962	733	319
65 → 01	70	135	146	161	171	180	191	201	202	190	146	67

Estas tasas han sido calculadas numéricamente mediante el método *close coupling* (CC) utilizando para ello el código MOLSCAT. Debido a los requerimientos numéricos del método, únicamente se han calculado aquellas tasas con $J = \{i, j, l, m\} \leq 7$ y $\Delta E/\beta B \leq 70$, donde i, j, l y m son los números cuánticos rotacionales de las moléculas involucradas en el proceso de colisión $\text{N}_2(i) + \text{N}_2(j) \rightarrow \text{N}_2(l) + \text{N}_2(m)$. Las tasas de transferencia están expresadas en unidades de $10^{-20} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ (ver Sección 11.5).

B.5. Tasas de transferencia escaladas experimentalmente, $k_{\mu\nu\rightarrow\rho\sigma}^{\text{down,es}}$ **TABLA B.2.**– Tasas de transferencia escaladas experimentalmente,
 $k_{\mu\nu\rightarrow\rho\sigma}^{\text{down,es}} (\times 10^{-20} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1})$

Proceso	$\Delta E/\beta B$	T_t (K)								
		35	28	22	18	14	10	8	6	4
06 \rightarrow 44	2	5045	4669	4154	3954	3858	3856	3911	4151	4775
34 \rightarrow 05	2	1172	1076	937	873	830	811	818	870	1013
07 \rightarrow 36	2	3746	3291	2670	2318	2010	1779	1728	1790	2027
55 \rightarrow 17	2	1501	1351	1167	1090	1050	1045	1060	1123	1287
25 \rightarrow 43	4	6236	5589	4779	4394	4107	3895	3843	3972	4461
63 \rightarrow 45	4	4625	3969	3206	2812	2505	2311	2285	2393	2746
03 \rightarrow 21	4	8726	8226	7509	7324	7395	7732	8041	8733	10207
41 \rightarrow 23	4	7704	7094	6265	5924	5734	5659	5677	5926	6665
20 \rightarrow 00	6	1078	1009	922	904	921	980	1034	1144	1374
21 \rightarrow 01	6	3047	2792	2487	2383	2359	2415	2488	2689	3168
22 \rightarrow 02	6	2677	2469	2193	2088	2042	2051	2086	2217	2562
23 \rightarrow 03	6	2444	2196	1919	1816	1774	1794	1838	1976	2307
24 \rightarrow 04	6	3110	2811	2447	2267	2157	2101	2107	2219	2556
25 \rightarrow 05	6	1664	1395	1138	1026	955	922	923	970	1113
26 \rightarrow 06	6	1975	1718	1451	1335	1267	1238	1248	1325	1550
27 \rightarrow 07	6	1218	1031	851	782	754	771	795	851	974
45 \rightarrow 61	6	2192	2019	1795	1726	1733	1827	1905	2032	2176
07 \rightarrow 45	6	5407	4742	3852	3354	2925	2605	2531	2612	2937
04 \rightarrow 22	8	6875	6491	5888	5730	5765	6008	6238	6760	7869
05 \rightarrow 14	8	3772	3529	3158	3018	2969	3030	3130	3408	4053
15 \rightarrow 33	8	5855	5396	4781	4536	4414	4398	4448	4699	5385
61 \rightarrow 25	8	4491	4242	3822	3645	3513	3340	3214	3165	3354
62 \rightarrow 44	8	4180	3736	3233	3024	2901	2839	2840	2962	3358
72 \rightarrow 36	8	3909	3559	2992	2641	2259	1808	1587	1472	1561
30 \rightarrow 10	10	1854	1751	1595	1548	1550	1604	1663	1811	2146
31 \rightarrow 11	10	3817	3508	3099	2933	2843	2820	2847	3011	3485
32 \rightarrow 12	10	4802	4359	3834	3636	3553	3583	3664	3934	4615
33 \rightarrow 13	10	4238	3900	3449	3270	3189	3160	3192	3368	3850
34 \rightarrow 14	10	3841	3407	2920	2715	2599	2572	2611	2794	3277
35 \rightarrow 15	10	5195	4645	3982	3678	3469	3342	3330	3483	3988
36 \rightarrow 16	10	2758	2378	1986	1803	1672	1583	1563	1619	1849
14 \rightarrow 03	10	1421	1325	1182	1124	1091	1074	1072	1108	1226
65 \rightarrow 72	10	2586	2491	2333	2334	2434	2635	2750	2865	2772
22 \rightarrow 00	12	288	264	232	218	211	211	214	228	266
05 \rightarrow 23	12	5353	4834	4261	4067	4026	4157	4325	4749	5725
61 \rightarrow 43	12	5182	4617	3963	3685	3524	3443	3432	3558	4004
07 \rightarrow 16	12	1710	1499	1211	1047	902	789	759	775	852
72 \rightarrow 54	12	4345	3899	3279	2938	2616	2285	2143	2125	2356
04 \rightarrow 02	14	3009	2784	2499	2409	2403	2485	2573	2786	3252
14 \rightarrow 12	14	3610	3348	2992	2858	2796	2790	2816	2960	3358
24 \rightarrow 22	14	4308	3922	3423	3204	3065	2996	3006	3162	3634
34 \rightarrow 32	14	4540	4113	3585	3367	3251	3240	3299	3535	4143
44 \rightarrow 42	14	4093	3706	3235	3044	2945	2934	2980	3174	3685
54 \rightarrow 52	14	3564	3197	2764	2581	2479	2453	2482	2625	2989
64 \rightarrow 62	14	5192	4574	3844	3497	3250	3094	3067	3184	3601
16 \rightarrow 05	14	879	834	755	722	696	660	632	619	652
25 \rightarrow 14	14	2608	2410	2115	1978	1879	1808	1792	1855	2073
23 \rightarrow 01	16	934	845	741	701	683	686	700	749	872
06 \rightarrow 24	16	6905	6315	5572	5280	5137	5126	5191	5484	6232
56 \rightarrow 07	16	525	509	480	482	504	547	570	594	576
17 \rightarrow 35	16	6109	5559	4892	4642	4545	4590	4686	5006	5820

05 \rightarrow 03	18	1351	1223	1071	1011	987	1001	1034	1127	1348
15 \rightarrow 13	18	5518	5055	4461	4226	4109	4094	4141	4376	5026
25 \rightarrow 23	18	3709	3422	3029	2871	2790	2780	2814	2981	3445
35 \rightarrow 33	18	4094	3678	3165	2937	2789	2719	2733	2889	3356
45 \rightarrow 43	18	3998	3654	3227	3068	3006	3038	3105	3307	3754
55 \rightarrow 53	18	3616	3219	2754	2551	2427	2378	2395	2529	2914
65 \rightarrow 63	18	3281	2907	2485	2293	2180	2151	2182	2315	2636
63 \rightarrow 25	18	2330	2074	1783	1638	1541	1496	1504	1592	1837
27 \rightarrow 16	18	1726	1576	1328	1173	1001	796	696	645	686
33 \rightarrow 11	20	889	813	713	669	642	627	626	650	730
04 \rightarrow 00	20	256	239	216	207	206	211	218	233	267
14 \rightarrow 10	20	650	598	527	498	480	469	466	479	524
24 \rightarrow 20	20	1672	1527	1332	1244	1184	1148	1146	1199	1371
34 \rightarrow 30	20	917	822	703	649	613	594	595	624	706
44 \rightarrow 40	20	745	685	606	575	560	556	562	594	678
54 \rightarrow 50	20	792	711	613	576	562	575	591	624	666
64 \rightarrow 60	20	990	876	739	675	632	606	603	625	699
07 \rightarrow 25	20	2903	2616	2258	2099	2000	1965	1988	2112	2439
06 \rightarrow 04	22	1801	1598	1366	1267	1211	1199	1216	1294	1496
16 \rightarrow 14	22	2562	2342	2060	1955	1892	1867	1879	1979	2281
26 \rightarrow 24	22	5753	5211	4526	4228	4043	3954	3964	4160	4753
36 \rightarrow 34	22	3360	2994	2560	2365	2236	2161	2153	2239	2516
46 \rightarrow 44	22	3372	2991	2536	2324	2179	2093	2084	2173	2468
56 \rightarrow 54	22	3204	2834	2393	2192	2061	2006	2027	2167	2566
05 \rightarrow 12	22	1785	1670	1507	1454	1452	1510	1576	1733	2079
36 \rightarrow 05	24	482	431	364	331	308	298	301	319	368
25 \rightarrow 03	24	808	743	652	612	586	573	574	602	686
07 \rightarrow 34	24	3039	2653	2144	1858	1608	1413	1360	1383	1515
34 \rightarrow 12	24	1946	1769	1537	1436	1373	1351	1363	1446	1672
24 \rightarrow 00	26	139	125	109	102	95	92	91	93	104
61 \rightarrow 23	26	2810	2632	2355	2237	2148	2039	1965	1944	2086
70 \rightarrow 50	26	865	774	682	653	646	653	662	700	801
71 \rightarrow 51	26	3360	3029	2626	2459	2373	2375	2430	2621	3112
72 \rightarrow 52	26	2640	2361	2025	1876	1779	1725	1725	1812	2087
26 \rightarrow 04	28	1071	971	846	792	758	739	738	768	867
44 \rightarrow 22	28	1084	986	861	810	780	772	777	820	936
05 \rightarrow 01	28	511	471	424	412	416	440	465	519	637
15 \rightarrow 11	28	1136	1051	935	890	869	872	887	946	1100
25 \rightarrow 21	28	1492	1383	1228	1163	1130	1124	1137	1204	1387
35 \rightarrow 31	28	3398	3070	2651	2458	2326	2244	2233	2329	2653
45 \rightarrow 41	28	1830	1683	1494	1430	1423	1475	1523	1614	1736
55 \rightarrow 51	28	1416	1277	1107	1037	1000	992	1003	1058	1208
65 \rightarrow 61	28	1495	1389	1247	1205	1210	1268	1318	1406	1521
34 \rightarrow 01	30	384	343	292	267	250	240	240	252	287
06 \rightarrow 22	30	1715	1586	1415	1353	1331	1348	1376	1463	1672
27 \rightarrow 43	30	2891	2628	2227	1995	1759	1496	1373	1329	1439
16 \rightarrow 03	32	438	418	381	368	359	348	339	341	373
27 \rightarrow 05	32	556	492	413	371	336	303	289	289	318
63 \rightarrow 41	32	1410	1250	1060	971	908	868	860	891	1002
45 \rightarrow 32	32	2235	2017	1758	1662	1631	1672	1719	1818	1965
25 \rightarrow 01	34	265	249	224	216	213	216	219	232	264
44 \rightarrow 02	34	417	380	333	313	302	298	301	319	369
07 \rightarrow 14	34	1047	926	761	669	589	526	507	515	562
17 \rightarrow 33	34	1844	1721	1493	1431	1418	1448	1485	1589	1844
06 \rightarrow 20	36	850	780	691	659	649	665	688	746	881
16 \rightarrow 12	36	1219	1146	1035	993	977	985	1006	1074	1238
26 \rightarrow 22	36	1778	1620	1409	1316	1257	1226	1228	1287	1465
36 \rightarrow 32	36	1778	1636	1454	1386	1351	1334	1332	1379	1530

46 → 42	36	3566	3173	2695	2474	2323	2237	2230	2331	2663
56 → 52	36	2114	1982	1801	1756	1780	1870	1929	2009	2017
55 → 33	36	919	819	704	657	632	628	637	675	779
45 → 03	38	463	423	374	358	357	372	386	408	432
35 → 11	38	675	609	523	482	452	429	423	435	486
70 → 23	38	1439	1278	1081	988	924	897	908	974	1153
44 → 00	40	52	47	41	39	37	37	37	39	46
65 → 43	40	1999	1852	1664	1613	1625	1704	1761	1843	1880
72 → 14	40	1042	955	819	744	672	595	561	560	627
60 → 00	42	104	96	86	82	82	85	88	97	115
61 → 01	42	218	201	178	170	165	166	169	179	204
62 → 02	42	629	572	496	463	441	428	427	445	504
63 → 03	42	344	313	274	258	248	243	244	254	286
64 → 04	42	707	629	535	491	461	443	441	458	517
65 → 05	42	377	350	313	301	301	311	321	336	352
45 → 21	42	988	883	770	725	710	731	753	791	829
07 → 03	44	473	439	401	392	394	402	407	427	482
17 → 13	44	1895	1746	1550	1478	1454	1480	1522	1648	1956
27 → 23	44	1641	1480	1273	1176	1101	1042	1023	1053	1185
55 → 31	46	753	672	579	542	524	524	531	562	642
63 → 21	46	699	638	561	530	511	497	492	502	545
26 → 00	48	48	43	38	35	33	32	32	34	39
45 → 01	48	239	217	189	179	177	184	190	199	203
07 → 12	48	483	433	369	338	318	310	315	340	404
56 → 14	50	904	850	776	763	781	830	861	896	880
27 → 03	50	321	289	246	224	205	187	179	180	198
46 → 22	50	890	781	651	590	545	517	512	532	605
36 → 01	52	106	97	87	84	82	82	82	85	95
07 → 01	54	182	179	175	180	192	208	218	237	286
17 → 11	54	464	426	377	357	350	355	367	401	486
27 → 21	54	560	508	445	421	409	409	413	435	493
56 → 23	54	1232	1170	1084	1075	1113	1197	1244	1291	1237
46 → 02	56	362	317	264	239	220	208	205	212	238
55 → 11	56	197	174	149	138	133	132	133	139	156
27 → 01	60	99	90	78	74	72	72	73	77	86
56 → 03	60	222	207	186	180	181	190	196	205	208
46 → 00	62	34	30	24	21	19	18	17	18	19
65 → 21	64	627	595	551	548	568	611	635	654	608
65 → 01	70	130	122	112	110	113	121	125	129	121

Las tasas están escaladas con respecto a las calculadas numéricamente con el factor de escala, $R(T_t)$, obtenido como valor promedio de los derivados al comparar los miembros izquierdo y derecho de la RMEQ (Ec. 10.36). Las tasas de transferencia están expresadas en unidades de $10^{-20} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ (ver Secciones 10.3.3.10, 11.5.1 y 11.5.2).

Apéndice C

Espectros teóricos de CH₂CHCN, CH₃CCH, CH₂CN y H₂CS

C.1. Introducción

Las nubes moleculares son grandes regiones de formación molecular, donde las condiciones físicas son muy distintas de las encontradas en la Tierra. Es por ello que en ocasiones, las observaciones espectroscópicas de estos objetos contienen líneas moleculares no identificadas incluso después de largas investigaciones. En estos casos, el procedimiento a seguir sería la preparación de un experimento que permitiera obtener el espectro de estas especies. Sin embargo, este objetivo a veces es difícil de alcanzar siendo necesario decantarse por los métodos teóricos para el cálculo de estos espectros.

Existen dos tipos de cálculos teóricos:

- los métodos *ab initio* y
- los métodos basados en ajustes por mínimos cuadrados.

Los métodos de cálculo *ab initio* tratan de obtener la estructura de niveles energéticos desde primeros principios, utilizando inicialmente la estructura molecular clásica para tratar luego el problema cuánticamente, obtener una geometría final y las interacciones cuánticas más importantes que se dan en ella. Este tipo de métodos son bastante complejos tanto teórica como numéricamente.

Un tratamiento desde primeros principios eficaz de los sistemas moleculares debe tratar las interacciones internas con precisión. No obstante, estas interacciones no se conocen todavía lo suficientemente bien como para proporcionar constantes espectroscópicas con errores relativos $\leq 5 - 10 \%$.

En observaciones de nubes moleculares es común encontrar líneas con anchuras $\lesssim 10 \text{ km s}^{-1}$ (5 MHz a 150 GHz), mientras que en observaciones de estrellas AGB estas anchuras son mayores variando entre 20 y 60 km s^{-1} (10 – 30 MHz a 150 GHz). Los espectros observados puede llegar a poseer rangos con una gran cantidad de líneas procedentes de especies moleculares conocidas y desconocidas, siendo crucial el disponer de frecuencias precisas para la identificación de líneas. Por lo tanto, en general los métodos *ab initio* no son útiles para esta tarea por la poca precisión alcanzada.

No obstante, estos métodos han dado buenos resultados en la identificación de bandas vibracionales de moléculas desconocidas en la Tierra, como es el caso de la confirmación de la banda fundamental ν_7 de la molécula C₅ observada con el satélite ISO en la nebulosa planetaria NGC 7027 (Goicoechea et al., 2004; Masso et al., 2007). La gran ventaja de estos métodos es que pueden proporcionar información relevante sobre el espectro de una molécula desconocida.

Los métodos basados en los ajustes por mínimos cuadrados no parten de primeros principios sino que tratan de generar el espectro completo en un intervalo de frecuencias a

partir de un conjunto relativamente pequeño de frecuencias experimentales. Su gran desventaja es que necesitan líneas ya identificadas. En general, estos métodos son muy eficaces para predecir las frecuencias de las líneas menos intensas de los espectros de moléculas poco conocidas con errores relativos menores al 0.1 % (mucho menores, en bastantes casos; Baskakov et al., 1996), determinando las constantes espectroscópicas con gran precisión (ver, por ejemplo, la detección del glicoaldehído, CH_2OHCHO , en Sgr B2 por Hollis et al., 2000).

Estos métodos proponen expresiones para la energía de los niveles involucrados en las transiciones (en adelante se considerarán niveles *rotacionales*) obtenidas a partir de Hamiltonianos parametrizados en los que las interacciones entre los diferentes momentos angulares moleculares están bien caracterizadas (*Hamiltoniano reducido de Watson*, Watson, 1967).

En este Apéndice se ajustará el Hamiltoniano a un conjunto de datos experimentales obtenidos de la literatura para obtener las constantes espectroscópicas de las moléculas CH_2CHCN , CH_3CCH , CH_2CN y H_2CS , todas ellas de interés astrofísico. Los motivos de descartar los métodos *ab initio* son su complejidad y la mayor precisión en las frecuencias derivadas con los métodos de ajuste por mínimos cuadrados.

C.1.1. Metodología

El objetivo de este estudio es el de intentar predecir el mayor número de líneas moleculares de las anteriores especies a partir de los datos experimentales existentes, que tengan la suficiente precisión como para identificar líneas en espectros de estrellas AGB. Para ello debemos proponer un proceso de tratamiento de datos que conste de dos partes. En la primera estimaremos la calidad de los ajustes comparando las frecuencias experimentales con los valores calculados correspondientes utilizando sus desviaciones relativas, $\varepsilon = |\nu_{\text{calc}} - \nu_{\text{exp}}|/\nu_{\text{exp}}$, donde ν_{exp} es la frecuencia experimental y ν_{calc} es la calculada mediante el ajuste. Relacionando la anterior expresión con la del efecto Doppler $\varepsilon_{\text{Doppler}} = |\nu - \nu_0|/\nu_0 = |v|/c$. Teniendo en cuenta que la semianchura de las líneas generadas por envolturas en expansión es $\simeq 10 - 30 \text{ km s}^{-1}$, diremos que una frecuencia calculada tiene calidad

- *buen*a, si $\varepsilon \leq 5 \times 10^{-5}$ ($\Leftrightarrow |v| \leq 15 \text{ km s}^{-1}$),
- *aceptable*, si $5 \times 10^{-5} < \varepsilon \leq 10^{-4}$ ($\Leftrightarrow 15 < |v| \leq 30 \text{ km s}^{-1}$), y
- *deficiente*, si $10^{-4} < \varepsilon$ ($\Leftrightarrow |v| > 30 \text{ km s}^{-1}$).

Las frecuencias calculadas de buena calidad deberían ser útiles para su utilización en la identificación de líneas espectrales pues indicarían con claridad a qué línea corresponden. Las frecuencias de calidad aceptable también indican la línea asociada pero menos claramente. En ocasiones podrían no ser útiles. Por último, sería difícil utilizar las frecuencias de calidad deficiente para identificaciones de líneas excepto en los casos poco frecuentes en los que las líneas buscadas estuvieran aisladas.

En la segunda parte del proceso estimaremos si las frecuencias interpoladas utilizando el ajuste son o no estables con la modificación del conjunto inicial de frecuencias experimentales. Si a éste se le añaden nuevas frecuencias puede ocurrir que existan diferencias significativas entre los nuevos ajustes y los antiguos, debido a la inclusión de nueva información sobre la estructura energética molecular. Esto indicaría que muchas de las frecuencias calculadas con el ajuste pueden ser falsas a pesar de ser precisas. Se puede hacer esta estimación utilizando conjuntos de frecuencias experimentales modificados del siguiente modo:

- se suprime del listado inicial de frecuencias experimentales una cantidad apreciable de ellas ($\simeq 10 \%$) al azar, se rehace el ajuste y se comparan las frecuencias calculadas de ambos ajustes;

- se suprime del listado inicial de frecuencias experimentales la misma cantidad que anteriormente pero en forma de un conjunto compacto, para luego rehacer el ajuste y comparar las frecuencias calculadas de ambos ajustes. Este caso lo repetiremos dos veces eliminando un conjunto compacto a frecuencias grandes y otro a frecuencias pequeñas.

C.2. El Hamiltoniano reducido de Watson

Las componentes de la diagonal de la matriz Hamiltoniana reducida de Watson según la *reducción* A^1 se pueden escribir en función de los números N y K , siendo el primero el número cuántico asociado al momento angular molecular, N , y el segundo el número cuántico asociado a la componente z del operador N , N_z (Judge & Clouthier, 2001; Townes & Schawlow, 1975):

$$\begin{aligned} \langle XNK | H^A | XNK \rangle = & T_0 + A_K K^2 + A_N N(N+1) - \Delta_K K^4 - \Delta_{NK} N(N+1) K^2 \\ & - \Delta_N N^2(N+1)^2 + H_K K^6 + H_{KN} N(N+1) K^4 \\ & + H_{NK} N^2(N+1)^2 K^2 + H_N N^3(N+1)^3 + L_K K^8 \\ & + L_{KKN} N(N+1) K^6 + L_{NK} N^2(N+1)^2 K^4 + L_{NNK} N^3(N+1)^3 K^2 \\ & + L_N N^4(N+1)^4 + M_K K^{10} + N_K K^{12}, \end{aligned} \quad (C.1)$$

mientras que las componentes de fuera de la diagonal son:

$$\begin{aligned} \langle XNK \pm 2 | H^A | XNK \rangle = & \left\{ \frac{1}{2} a - \delta_N N(N+1) + h_N N^2(N+1)^2 + l_N N^3(N+1)^3 \right. \\ & + \frac{1}{2} [-\delta_K + h_{NK} N(N+1) + l_{NK} N^2(N+1)^2] \\ & \times [(K \pm 2)^2 + K^2] + \frac{1}{2} [h_K + l_{KN} N(N+1)] \\ & \times [(K \pm 2)^4 + K^4] + \frac{1}{2} l_K [(K \pm 2)^6 + K^6] \Big\} \\ & \times F_{\pm}(N, K) F_{\pm}(N, K \pm 1), \end{aligned} \quad (C.2)$$

donde X representa a los números cuánticos distintos de N y K , y $F_{\pm}(N, K) = [N(N+1) - K(K \pm 1)]^{1/2}$, $A_K = A - (B + C)/2$, $A_N = (B + C)/2$ y $a = (B - C)/2$ para un rotor asimétrico prolata², siendo A , B y C las constantes rotacionales utilizadas usualmente en espectroscopía. Para un rotor asimétrico oblate, $A_K = C - (B + A)/2$, $A_N = (B + A)/2$ y $a = (B - A)/2$. Si la molécula es prolata, $K = K_a$ mientras que si es oblate, $K = K_c$. El resto de los elementos de la matriz Hamiltoniana son iguales a cero. El número de constantes espectroscópicas se puede ampliar para incluir modificaciones cuyos órdenes de magnitud sean cada vez menores. Es posible añadir términos que representen interacciones como aquéllas que dan lugar a la estructura hiperfina cuadrupolar eléctrica o a la dipolar magnética.

¹Una *reducción* es una manera de escribir el Hamiltoniano reducido, ya que el proceso de derivación de éste hace que la expresión del operador reducido no sea única.

²Esta expresión es un abuso del lenguaje puesto que un rotor asimétrico no puede ser prolata ya que dicho concepto implica una simetría axial. Por tanto, al hablar de rotor asimétrico prolata supondremos un rotor asimétrico que está más cerca de ser prolata que oblate.

En el caso de las moléculas simétricas la matriz Hamiltoniana es diagonal:

$$\begin{aligned}
 E_{XJK} = & T_0 + A_K K^2 + BJ(J+1) - \Delta_K K^4 - \Delta_{JK} J(J+1)K^2 - \Delta_J J^2(J+1)^2 \\
 & + H_K K^6 + H_{KJ} J(J+1)K^4 + H_{JK} J^2(J+1)^2 K^2 + H_J J^3(J+1)^3 \\
 & + L_K K^8 + L_{KKJ} J(J+1)K^6 + L_{JK} J^2(J+1)^2 K^4 + L_{JJK} J^3(J+1)^3 K^2 \\
 & + L_J J^4(J+1)^4 + M_K K^{10} + N_K K^{12},
 \end{aligned} \quad (C.3)$$

donde $A_K = A - B$ si la molécula es prolata y $A_K = C - B$ si es oblate. La expresión para las frecuencias de las transiciones dipolares eléctricas del tipo $(J+1, K') \rightarrow (J, K'')$ en el estado vibracional fundamental cumple que $\Delta K = 0$:

$$\begin{aligned}
 \nu_{JK} = & 2B(J+1) - 2\Delta_{JK}(J+1)K^2 - 4\Delta_J(J+1)^3 + 2H_{KJ}(J+1)K^4 \\
 & + 4H_{JK}(J+1)^3 K^2 + 2H_J(J+1)^3[3J^2 + 6J + 4] + 2L_{KKJ}(J+1)K^6 \\
 & + 4L_{JK}(J+1)^3 K^4 + 2L_{JJK}(J+1)^3[3J^2 + 6J + 4]K^2 \\
 & + 8L_J(J+1)^4[J^3 + 3J^2 + 4J + 2].
 \end{aligned} \quad (C.4)$$

C.2.1. Estructura hiperfina

Hasta el momento hemos supuesto que el Hamiltoniano representa la rotación molecular, ya sea la molécula simétrica o asimétrica. Pero muchas de estas moléculas sufren perturbaciones debidas a procesos internos que producen desdoblamientos en los niveles rotacionales, dando lugar a la *estructura hiperfina* de la molécula. Actualmente, para muchas especies moleculares, las técnicas espectroscópicas tienen la resolución espectral necesaria como para poder detectar estos desdoblamientos.

En dos de las moléculas que vamos a estudiar (CH_2CHCN , CH_2CN), la estructura hiperfina es observable generándose a partir de diferentes procesos (por ejemplo, [Saito & Yamamoto, 1997](#)):

- la procedente de la interacción entre la nube electrónica molecular y el momento cuadrupolar de algún núcleo atómico (estructura hiperfina cuadrupolar eléctrica),
- la generada por la interacción entre el momento angular molecular y el spin de los electrones desapareados (estructura hiperfina dipolar magnética), y
- la debida a la interacción entre el spin de esos electrones y los de los núcleos atómicos (interacción spin-spin).

Cada interacción viene representada por un término que se añade al Hamiltoniano de Watson y que modifica los niveles de rotación desdoblándolos. Los acoplamientos entre los diferentes momentos angulares dan lugar a nuevos números cuánticos que permiten la identificación de los nuevos niveles. De este modo, es posible nombrar los nuevos niveles de la siguiente manera:

$$|NK_a K_c S J I_1 F_1 I_2 F_2 \cdots F_{n-1} I_n F\rangle. \quad (C.5)$$

En la anterior expresión, S es el número cuántico asociado al operador \mathbf{S} , que es el momento angular total de spin de los electrones desapareados. F_1 es el número que representa al momento angular $\mathbf{J} = \mathbf{N} + \mathbf{S}$ procedente del acoplamiento entre la rotación molecular y el spin total electrónico. Suponiendo que en la molécula hay n momentos angulares distintos de \mathbf{N} y \mathbf{S} , I_j es el número cuántico asociado al j -ésimo momento angular de ese conjunto, \mathbf{I}_j . Así pues, definimos F_j como el número cuántico asociado al momento angular $\mathbf{F}_j = \mathbf{F}_{j-1} + \mathbf{I}_j$ procedente del acoplamiento del momento \mathbf{I}_j con \mathbf{F}_{j-1} , siendo $\mathbf{F}_1 = \mathbf{J} + \mathbf{I}_1$. Por último, F es el número cuántico que representa al momento angular total producido a partir del acoplamiento de todos los momentos angulares moleculares ($\mathbf{F} = \mathbf{F}_{n-1} + \mathbf{I}_n$).

C.3. Método de ajuste

El método de ajuste es similar para las moléculas simétricas (CH₃CCH) y no simétricas (CH₂CHCN, H₂CS y CH₂CN), aunque la dificultad es mayor en el tratamiento teórico del espectro de las asimétricas con respecto a las simétricas.

C.3.1. Moléculas simétricas

La diagonalidad del Hamiltoniano para las moléculas simétricas simplifica en gran medida el tratamiento numérico de las frecuencias de las líneas observadas porque la expresión para las frecuencias dada por la Ec. C.4 es lineal en las constantes espectroscópicas. Por lo tanto, definiendo la función $\chi^2 = \sum_{i=1}^n [\nu_i - f(\alpha, J_i, K_i)]^2 / n$, donde α es el vector de parámetros y $f(\alpha, J_i, K_i)$ la expresión de la frecuencia, se puede desarrollar un código sencillo que proporcione los valores de α y sus errores estadísticos. Estas incertidumbres no muestran claramente la calidad del ajuste, por lo que utilizaremos el proceso de estimación de la calidad de los ajustes expuesto en la Sección C.1.1.

Dependiendo de la precisión requerida para las frecuencias calculadas que busquemos, utilizaremos unas constantes u otras. Sin embargo, la mejora del ajuste por medio de la utilización de un número excesivo de constantes no implica una mejor descripción del fenómeno físico subyacente, pues disminuye la cantidad de información física contenida. Es por ello que la mejor opción es elegir el menor número de constantes espectroscópicas posible que mejor ajuste la nube de puntos, siendo las constantes representativas aquéllas cuyos errores relativos sean pequeños.

C.3.2. Moléculas asimétricas

El método seguido para el estudio de los espectros de las moléculas asimétricas es distinto que para las simétricas puesto que el Hamiltoniano que las describe es más complicado. Éste no puede ser diagonalizado pero sí es posible obtener las energías de cada uno de sus niveles. El desarrollo de un programa informático que permita ajustar un espectro rotacional de una molécula asimétrica es complicado, por lo que hemos decidido utilizar los paquetes SPFIT/CALPGM y SPCAL/CALPGM (Pickett, 1991).

El programa SPFIT (Pickett, 1991) es uno de los más potentes que se pueden encontrar hoy en día, siendo ampliamente utilizado por la comunidad científica. SPFIT permite ajustar casi cualquier tipo de espectro experimental mediante el método de los mínimos cuadrados, utilizando en la minimización el método de Levenberg-Marquardt (Marquardt, 1963). Gracias a un método flexible de construcción de operadores cuánticos, permite ajustar cualquier tipo de molécula, simétrica o asimétrica, e incluir en el ajuste una gran variedad de interacciones cuánticas, como pueden ser las interacciones spin-spin o cuadrupolar eléctrica nuclear. El paquete SPFIT devuelve las constantes espectroscópicas elegidas para participar en el ajuste con sus errores estadísticos y el valor calculado de las frecuencias experimentales usadas. El programa SPCAT se utiliza para generar el espectro sintético a partir de las constantes obtenidas con SPFIT.

La comparación de las frecuencias calculadas con las experimentales se realiza del mismo modo que en el caso de las moléculas simétricas, una vez calculado el espectro sintético con el programa SPCAT y las constantes derivadas del ajuste. La estimación de la calidad de las frecuencias obtenidas mediante el cálculo se puede hacer del mismo modo que para las moléculas simétricas.

C.4. Resultados

En esta Sección se incluyen los resultados de los ajustes por orden de complejidad de las moléculas, comenzando por la más sencilla. Con el fin de evitar la inclusión de largas Tablas con todas las frecuencias experimentales se proporciona un pequeño listado representativo

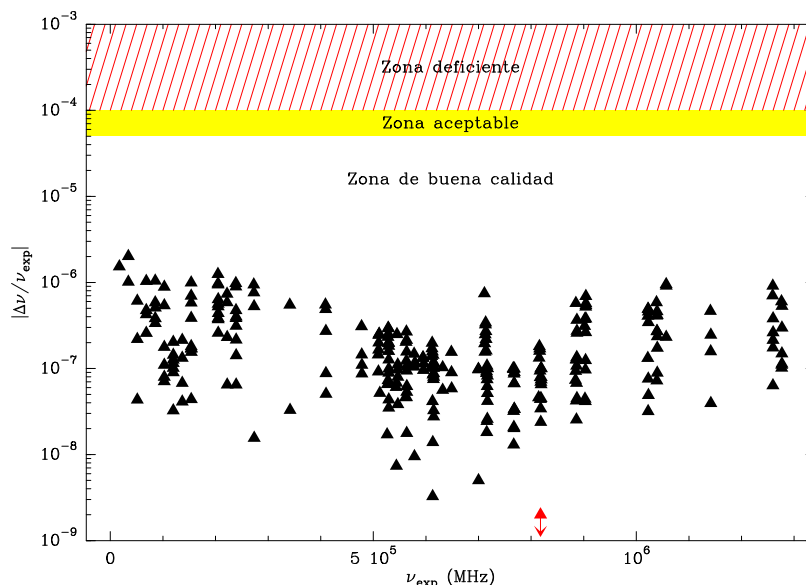


FIGURA C.1.— Desviación relativa del ajuste del CH_3CCH . La Figura muestra la división en las tres zonas definidas en el texto: la *zona deficiente*, la *zona aceptable* y la *zona de buena calidad*. Los triángulos rojos con la flecha hacia abajo indican que la desviación relativa de la frecuencia calculada es todavía menor que el menor valor que el eje de las desviaciones relativas permite representar. El ajuste es lo suficientemente bueno como para que todos los puntos estén en la zona de buena calidad, bastante apartados de la frontera con la zona aceptable. Las constantes derivadas de este ajuste se pueden encontrar en la Tabla C.1.

(Tabla C.6), los valores de las constantes derivadas junto con sus errores estadísticos, una representación gráfica del error relativo de las frecuencias calculadas con respecto a las experimentales y la desviación típica de la distribución de desviaciones de las frecuencias calculadas con respecto a las experimentales, $\Delta\nu = |\nu_{\text{exp}} - \nu_{\text{calc}}|$. Además, las constantes espectroscópicas se comparan con las de otros autores. Por último, haremos el estudio de estabilidad de las soluciones para ver si las frecuencias calculadas interpoladas a partir de las constantes espectroscópicas pueden ser utilizadas para la identificación de líneas desconocidas en observaciones astrofísicas o no.

C.4.1. CH_3CCH

El CH_3CCH o propino es un rotor simétrico prolata sin estructura hiperfina apreciable. Las frecuencias experimentales a ajustar han sido tomadas de los trabajos de [Dubrulle et al. \(1978\)](#), [Ware & Roberts \(1984\)](#), [Wlodarczak et al. \(1988\)](#), [Müller et al. \(2000\)](#) y [Bocquet et al. \(1994\)](#). El conjunto total ajustado está formado por 278 frecuencias entre 17 GHz y 1.3 THz. El cálculo de las frecuencias teóricas ha sido realizado según lo expuesto en la Sección C.1.1. Las desviaciones relativas de las frecuencias calculadas se pueden ver en la Figura C.1. La Tabla C.1 contiene las constantes obtenidas mediante el ajuste de las frecuencias experimentales. En ella se pueden encontrar, además, las mismas constantes calculadas por otros autores para permitir comparaciones.

Las constantes calculadas son en general muy similares a las propuestas por investigaciones previas. Sin embargo, tanto H_{JK} como H_{KJ} son menores que aquéllas en un $\sim 5\%$. Este desacuerdo no puede ser suprimido mediante la adición de más constantes espectroscópicas en el ajuste. De hecho, al añadir más, la calidad de las otras constantes se degrada sin que mejore el resultado del ajuste significativamente, indicando una sobresaturación en

TABLA C.1.— Constantes espectroscópicas del CH₃CCH

Constante	Valor (MHz) ^a	Valor (MHz) ^b	Valor (MHz) ^c	Valor (MHz) ^d
B	8545.87766(5)	8545.87712(6)	8545.876888(19)	8545.8768831(220)
Δ_{JK}	0.16330770(53)	0.163423(10)	0.1634220(48)	0.16341306(227)
$\Delta_J \times 10^3$	2.939499(6)	2.9423(7)	2.939352(83)	2.9393443(316)
$H_{KJ} \times 10^6$	4.9721(8)	5.23(14)	5.304(47)	5.2914(116)
$H_{JK} \times 10^6$	0.869176(48)	0.935(68)	0.9049(40)	0.91451(113)
$H_J \times 10^{12}$	—	—	—	−29.6(95)
$L_{KKJ} \times 10^{12}$	—	—	—	−417.1(214)
$L_{JK} \times 10^{12}$	—	—	—	−39.15(223)
$L_{JJK} \times 10^{12}$	—	—	—	−6.588(232)
σ	0.211	0.0014	0.00044 ^e	0.755

(a) Este trabajo, (b) Dubrulle et al. (1978), (c) Wlodarczak et al. (1988), (d) Müller et al. (2000), ajuste 1, (e) χ^2 reducido del ajuste. El parámetro σ es la desviación típica de la nube de la distribución de desviaciones absolutas de los valores de $\nu_{\text{exp}} - \nu_{\text{calc}}$. Todos los ajustes desarrollados por Müller et al. (2000) generan constantes muy similares por lo que hemos optado por utilizar el ajuste 1 como conjunto de constantes representativo de todos. Los valores obtenidos mediante nuestro ajuste proporcionan constantes espectroscópicas compatibles con las de trabajos previos, aunque en el caso de H_{JK} y H_{KJ} son $\sim 5\%$ menores (ver texto).

el número de constantes usadas.

Tomando los tres conjuntos de constantes publicados (ver Tabla C.1) y calculando las desviaciones relativas de las frecuencias calculadas frente a las experimentales, observamos que los tres ajustes sufren un gran aumento (de hasta dos órdenes de magnitud) entre la zona de frecuencias pequeñas y la zona de frecuencias intermedias, siendo la de frecuencias pequeñas la mejor ajustada con diferencia. La zona de frecuencias grandes se mantiene relativamente estable. Por supuesto, todos los ajustes son buenos, siendo las desviaciones relativas siempre menores que 10^{-5} .

Los tres trabajos de los que hemos tomado las constantes, utilizan Δ_J para hacer los ajustes. La inclusión de Δ_J no hace que las constantes H_{JK} y H_{KJ} adopten valores más próximos a los publicados. Por otra parte, Müller et al. (2000) utilizan las constantes H_J , L_{JJK} , L_{JK} y L_{KKJ} , cuyos órdenes de magnitud varían entre 10^{-9} y 10^{-12} MHz y no mejoran tampoco nuestros resultados. Esta es la razón de no haberlos utilizado en el ajuste final. Para verificar la corrección del programa desarrollado hemos realizado el ajuste también con el programa SPFIT, encontrando que las constantes generadas son exactamente las mismas que las derivadas con nuestro programa, cuando consideramos las mismas constantes. Al añadir más constantes al ajuste con el programa SPFIT (H_J , L_{JJK} , L_{JK} y L_{KKJ}), las constantes toman valores más próximos a los publicados. No ocurre así con el programa que hemos desarrollado.

Tanto Dubrulle et al. (1978) como Wlodarczak et al. (1988) utilizan sus propios conjuntos de datos, mientras que Müller et al. (2000) usan datos obtenidos por ellos mismos además de los de trabajos previos. Los conjuntos de datos utilizados por los dos primeros son menos completos que los utilizados por Müller et al. (2000) y por nosotros, por lo que es de esperar ciertas diferencias entre nuestras constantes y las de Dubrulle et al. (1978) y Wlodarczak et al. (1988). Pero no así con las de Müller et al. (2000). Por lo tanto, es probable que las diferencias entre nuestras constantes y las de Müller et al. (2000) provengan del procedimiento de ajuste y del uso de un programa diferente. Este hecho se sustenta al calcular las diferencias entre las frecuencias experimentales y las calculadas, $\Delta\nu$ (ver Ta-

bla C.6). Se observa que para gran parte de las transiciones $\Delta\nu$ es negativo, lo que implica un error sistemático en el proceso del ajuste, tal vez por falta de constantes o por falta de sensibilidad del programa a diferencias tan pequeñas. Las constantes H_{JK} y H_{KJ} son 9 órdenes de magnitud menores que la constante principal B . Es por ello que puede ser necesario reescalar las constantes antes del proceso de ajuste a fin de tratar adecuadamente el problema numérico. Igualmente, el pesar los sumandos de la función χ^2 con las frecuencias experimentales ($1/\nu_{\text{exp}}^2$) podría mejorar los resultados.

Aún así, las constantes derivadas son bastante similares a las publicadas con anterioridad y las frecuencias experimentales están bien ajustadas por lo que estas diferencias no impiden que alcancemos nuestro objetivo.

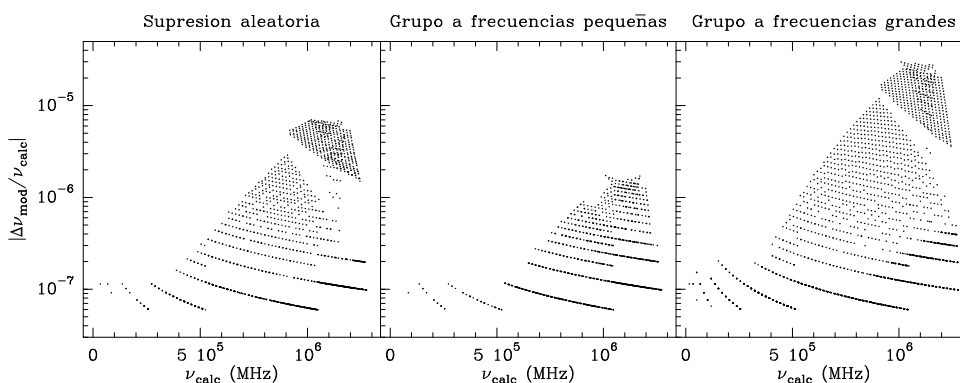


FIGURA C.2.— Estudio de estabilidad de las frecuencias calculadas (CH_3CCH). En la Figura se observan tres tipos de estudio: suprimimos el 10 % de las líneas a ajustar de forma aleatoria (izquierda), suprimimos la misma cantidad de líneas en forma de grupo compacto con frecuencias pequeñas (centro), y por último, hacemos lo mismo a frecuencias grandes. Las magnitudes representadas son las desviaciones relativas de las frecuencias calculadas modificadas según el tipo de estudio (ν_{mod}) con respecto al mejor el ajuste (ν_{calc}) del conjunto completo de frecuencias experimentales ($\Delta\nu_{\text{mod}} = (\nu_{\text{calc}} - \nu_{\text{mod}})/\nu_{\text{calc}}$). La escala de las tres gráficas es la misma para facilitar la comparación. La modificación más importante en el conjunto de líneas a ajustar procede de la supresión de un conjunto compacto de líneas a frecuencias grandes.

El estudio de la estabilidad (ver Figura C.2) sugiere que la modificación más importante que puede sufrir el espectro procede de la falta de líneas situadas a grandes frecuencias en el rango estudiado. Los efectos más importantes se producen en la zona de frecuencias medias y grandes debido a que una pequeña modificación en las constantes espectroscópicas H_J , H_{JK} y H_{KJ} produce variaciones apreciables en los resultados cuando J y K son grandes, no viéndose apenas afectadas las frecuencias pequeñas. Estos resultados demuestran que las frecuencias calculadas son estables con respecto al problema de la identificación de líneas moleculares en envolturas circunestelares, puesto que las modificaciones esperadas en la magnitud $\Delta\nu/\nu_{\text{exp}}$ al cambiar el conjunto de frecuencias a ajustar no produce variaciones lo suficientemente grandes como para reducir significativamente la calidad de las frecuencias.

C.4.2. H_2CS

El H_2CS (tioformaldehído) es un rotor asimétrico prolata³. El conjunto de frecuencias experimentales está formado por 56 frecuencias tomadas de los trabajos de [Johnson et al. \(1971\)](#) y [Beers & Klein \(1972\)](#) entre 3 y 250 GHz, no habiendo sido posible conseguir un número mayor. La desviación relativa ε se puede encontrar representada en la Figura C.3.

³A pesar de ser asimétrico está más cerca de ser un rotor simétrico prolata que oblate.

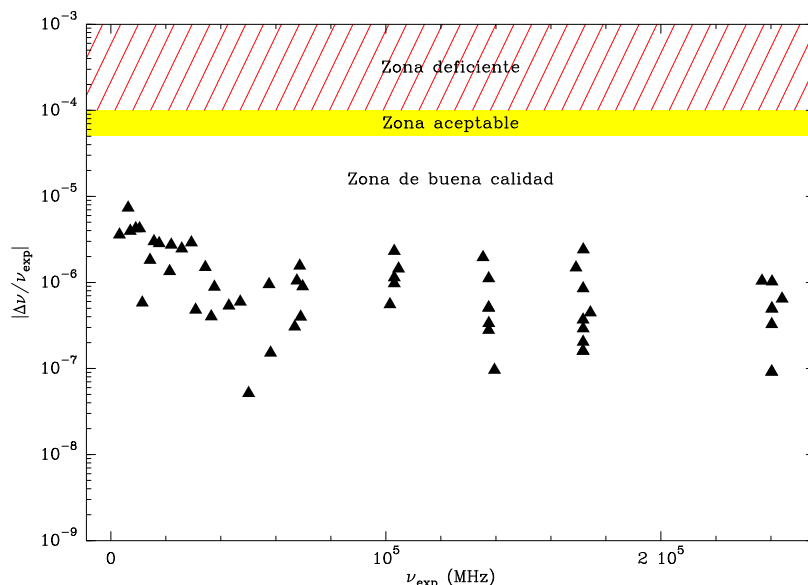


FIGURA C.3.— Desviación relativa del ajuste del H_2CS . Las desviaciones de las frecuencias calculadas con respecto a las experimentales están al menos 1 orden de magnitud por debajo de la frontera de la zona de buena calidad con la zona aceptable. Por lo tanto, el ajuste es bueno.

En la Tabla C.2 se muestran las constantes derivadas de los ajustes junto con las de otros autores.

Todos los puntos ajustados están en la zona de buena calidad. La zona peor ajustada es la de frecuencias pequeñas disminuyendo su error relativo en un orden de magnitud en la zona de frecuencias mayores. Esta zona contiene varias frecuencias generadas por transiciones entre niveles con número J grande ($J = 15, 16$) y valores de K pequeños ($K = 2$). La utilización de constantes como H_J y L_J debería mejorar el ajuste pero degrada el resto de los parámetros no mejorando significativamente el ajuste. Por lo tanto, no se han utilizado.

Las constantes derivadas en el presente trabajo son compatibles con los resultados previos, siendo muy parecidas principalmente a las de [Clouthier & Ramsay \(1983\)](#). Las diferencias entre nuestros resultados y los obtenidos por [Turner et al. \(1981\)](#) pueden proceder del hecho de que estos autores utilizan datos infrarrojos procedentes de transiciones rovi-bracionales en su estudio. Por otro lado, los resultados de [McNaughton & Bruget \(1993\)](#) son más confiables que los derivados en este estudio y por el resto de autores a consecuencia del número de frecuencias ajustadas (755) correspondientes a transiciones rotacionales con $J \leq 51$ y $K \leq 9$. Desafortunadamente no nos ha sido posible conseguir estos datos para usarlos en nuestro estudio.

El pequeño número de frecuencias utilizadas puede hacer que el ajuste sea inestable. En la Figura C.4 se representan las desviaciones relativas de las frecuencias calculadas durante el estudio de estabilidad. Los resultados indican que modificar el archivo inicial de datos añadiendo líneas a frecuencias grandes puede producir un ajuste que dé lugar a frecuencias calculadas diferentes de las actuales, principalmente en la zona entre 0 y 30 GHz. El resto del espectro también sufriría variaciones significativas pero las líneas calculadas seguirían siendo útiles para la identificación de líneas en espectros astrofísicos.

La falta de estabilidad es consecuencia del uso de un número pequeño de frecuencias experimentales a ajustar. La estructura rotacional no está todavía bien determinada, al contrario de lo que ocurre en el trabajo de [McNaughton & Bruget \(1993\)](#). No obstante, los resultados obtenidos pueden ser utilizados en la búsqueda de líneas procedentes de transiciones entre niveles rotacionales con valores pequeños de J y K .

TABLA C.2.— Constantes espectroscópicas del H₂CS

Constante	Valor (MHz) ^a	Valor (MHz) ^b	Valor (MHz) ^c	Valor (MHz) ^d
A	291619.8*	291619.8(36)	291611.7(34)	291607.9
B	17699.71428(49)	17698.9951(15)	17699.731(14)	17698.8
C	16651.74206(49)	16652.5021(15)	16651.749(14)	16652.7
Δ_K	23.99*	23.99(35)	22.851(59)	22.850
Δ_{JK}	0.5211880(280)	0.52442(35)	0.5224(18)	0.537
$\Delta_J \times 10^3$	19.5232(67)	18.9776(89)	19.45(19)	19.43
δ_K	0.369927(55)	—	0.3718(17)	—
$\delta_J \times 10^3$	1.204639(95)	—	1.2052(14)	—
σ	0.116	0.6555	—	—

(a) Este trabajo, (b) [McNaughton & Bruget \(1993\)](#), (c) [Clouthier & Ramsay \(1983\)](#), (d) [Turner et al. \(1981\)](#). Los campos correspondientes a la magnitud σ de los datos de (c) y (d) no han sido publicados por los autores. En el caso de los campos correspondientes a las constantes δ_J y δ_K de los ajustes de las referencias (b) y (d), no se han incluido en la Tabla por haber optado los autores por la utilización de la reducción S del Hamiltoniano de Watson en sus estudios. Por lo tanto, puede haber ligeras diferencias adicionales en las constantes comunes de ambas reducciones entre los diferentes trabajos, además de las propias de los ajustes estadísticos. Los errores de los valores propuestos en (d) no fueron publicados por los autores. El valor de las constantes marcadas con un * durante el ajuste ha sido fijado a los valores de [McNaughton & Bruget \(1993\)](#) para evitar divergencias debido a que las frecuencias consideradas en nuestro ajuste ($\Delta K = 0$) no permiten la determinación de las constantes relacionadas únicamente con el número cuántico K (A_K o A , Δ_K , H_K , etc.).

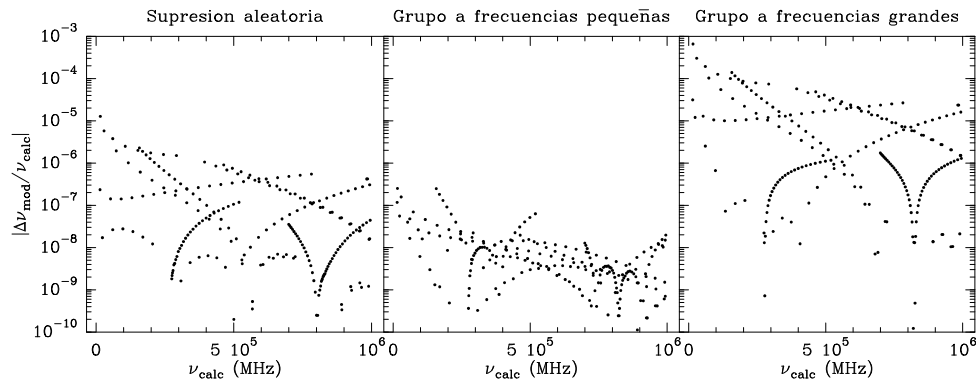


FIGURA C.4.— Estudio de estabilidad de las frecuencias calculadas (H₂CS). La información sobre los estudios realizados y el significado de las gráficas se puede encontrar en la Figura C.2 y en el texto. La modificación que genera variaciones más severas en las frecuencias calculadas es en la que se añaden (o eliminan) transiciones a frecuencias grandes. Las variaciones son tales que podrían llegar inutilizar la región de frecuencias pequeñas para la identificación de líneas espectroscópicas en espectros astrofísicos. Es muy probable que las grandes variaciones que se observan entre los tres estudios estén relacionadas con el pequeño número de frecuencias utilizadas en el ajuste.

C.4.3. CH₂CHCN

El CH₂CHCN (cianuro de vinilo o acrilonitrilo) es una molécula asimétrica prolata. Contiene 3 átomos de H y 1 de N y presenta una estructura hiperfina cuadrupolar eléctrica producida por el átomo de N. La interacción entre los spines de los átomos de H y el de N es muy pequeña no siendo necesaria su consideración. Las frecuencias han sido tomadas de los trabajos de Demaison et al. (1994), Baskakov et al. (1996) y Colmont et al. (1997). Tanto los datos de Baskakov et al. (1996) como del Colmont et al. (1997) presentan una estructura hiperfina bien diferenciada. Por otro lado, en los datos de Demaison et al. (1994) no se observa estructura hiperfina debido posiblemente a falta de resolución espectral (mejor que 0.5 MHz). Se han considerado estos últimos datos tomando las transiciones más intensas de cada multiplete ($\Delta F = \Delta N$) a la misma frecuencia, siendo esta frecuencia la observada experimentalmente. El conjunto inicial de datos está compuesto por 1037 frecuencias entre 5 y 910 GHz.

TABLA C.3.— Constantes espectroscópicas A , B y C del CH₂CHCN calculadas por métodos *ab initio*

Tipo	Método	A (MHz)	B (MHz)	C (MHz)
Semiempírico	AM1	50382.6198	4958.0437	4513.8460
	PM3	49305.4397	5017.7106	4554.2356
Hartree-Fock	6-31g**	50920.2152	5025.7764	4574.2976
	6-311g**	51105.7602	5045.3061	4591.9734
	6-311+g**	51109.7898	5040.2267	4587.7979
MP2	6-31g**	49476.8183	4907.6338	4464.7707
	6-311g**	49272.5275	4920.1621	4473.4598
	6-311+g**	49427.3121	4909.0332	4465.5251
	6-311g(2df,2p)	49949.2319	4963.5377	4514.8860
MP2 (Full)	6-31g**	49607.8010	4918.6671	4474.9691
	6-311g**	49357.5489	4929.2504	4481.6736
	6-311+g**	49522.6460	4917.9916	4473.7161
Ajuste mínimos cuadrados		49850.64892(43)	4971.2081574(332)	4513.8240254(332)

Es posible calcular una aproximación a las constantes rotacionales principales mediante métodos *ab initio* (columnas de la izquierda; los datos han sido calculados por F. Meléndez). Cualquiera de estas aproximaciones sirve como conjunto de valores iniciales para el proceso de ajuste de las frecuencias experimentales. Para poder comparar la bondad de los valores obtenidos *ab initio* hemos añadido en la última fila las constantes principales derivadas de los ajustes por mínimos cuadrados. La desviación típica de los conjuntos de valores *ab initio* con respecto a los valores ajustados es mínima para los resultados del método MP2/6-311g(2df,2p) con $\sigma \simeq 60$ MHz.

En esta ocasión hemos partido de constantes rotacionales calculadas mediante métodos *ab initio*⁴ (Tabla C.3). Una elección adecuada de las constantes principales de la molécula es necesaria para comenzar con un proceso de ajuste que converja rápidamente. Para ello, hemos utilizado diferentes métodos con diferentes bases de autoestados que nos proporcionan constantes distintas en cada caso con desviaciones entre ellas $< 2\%$. Las constantes calculadas *ab initio* son bastante próximas entre ellas y a los valores obtenidos a partir de los ajustes. Entre todos los grupos de constantes calculadas, se ve que el más próximo al conjunto de valores obtenidos de los ajustes es el derivado mediante el método MP2/6-311g(2df,2p), distando unas constantes de otras en $0.02 - 0.2\%$.

Los valores de las constantes obtenidos con el ajuste se pueden encontrar en la Tabla C.4 mientras que en la Figura C.5 hemos representado las desviaciones relativas de las frecuencias calculadas mediante el ajuste con respecto a las experimentales. En la Figura se observa

⁴Las constantes han sido calculadas por Francisco Meléndez.

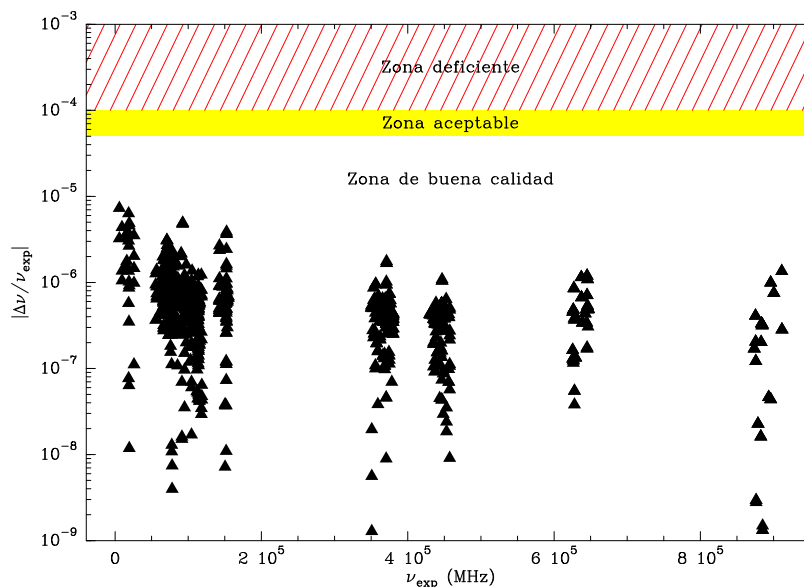


FIGURA C.5.— Desviación relativa del ajuste del CH_2CHCN . A pesar de que el conjunto de frecuencias ajustadas no contiene información sobre varias zonas del espectro, el ajuste a los datos experimentales es bastante bueno estando todos los puntos en la zona de buena calidad y más de un orden de magnitud por debajo de la frontera con la zona de calidad aceptable.

la gran cantidad de puntos existentes en ciertas zonas del espectro, especialmente por debajo de los 200 GHz. La desviación relativa de todas las frecuencias calculadas está por debajo de 10^{-5} , lo que supone que el ajuste es de buena calidad y la desviación máxima ≈ 1 MHz ó 3 km s^{-1} en todo el rango estudiado.

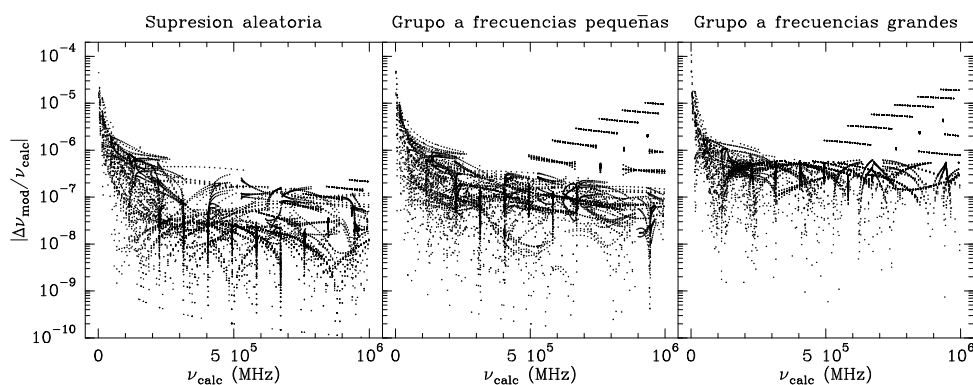


FIGURA C.6.— Estudio de estabilidad de las frecuencias calculadas (CH_2CHCN). La información sobre el significado de las gráficas y los estudios que representa cada una se pueden encontrar en la Figura C.2 y en el texto. El número de frecuencias utilizadas en estos estudios es muy superior al de H_2CS y CH_3CCH , lo cual se aprecia muy bien en las tres gráficas. El comportamiento de la nube de puntos es prácticamente el mismo salvo por pequeñas diferencias relativas en forma de grupos lineales en las gráficas central y derecha, con respecto a la izquierda. El grueso de la nube de puntos parece tener un comportamiento bastante estable.

La mayor parte de las constantes utilizadas están en buen acuerdo con las propuestas por otros autores a excepción de H_{KJ} , H_{JK} y $\chi_{bb} - \chi_{cc}$, produciéndose la desviación más

TABLA C.4.– Constantes espectroscópicas del CH₂CHCN

Constante	Valor (MHz) ^a	Valor (MHz) ^b	Valor (MHz) ^c	Valor (MHz) ^d	Valor (MHz) ^e
<i>A</i>	49850.64892(43)	49850.68907(491)	49850.69805(44)	49850.6985(20)	—
<i>B</i>	4971.2081574(332)	4971.212817(412)	4971.213195(33)	4971.21330(18)	—
<i>C</i>	4513.8240254(332)	4513.828233(393)	4513.828309(34)	4513.82896(18)	—
Δ_K	2.7144174(121)	2.714735(242)	2.715147(23)	2.715020(71)	—
$\Delta_{JK} \times 10^3$	−85.450121(179)	−85.41195(795)	−85.38059(82)	−85.3815(25)	—
$\Delta_J \times 10^3$	2.2413546(73)	2.243057(571)	2.244438(39)	2.24462(13)	—
$\delta_K \times 10^3$	24.62526(66)	24.5270(283)	24.6340(29)	24.629(10)	—
$\delta_J \times 10^3$	0.45631249(227)	0.456701(76)	0.4567086(87)	0.456398(18)	—
$H_K \times 10^6$	374.718(108)	375.51(310)	382.20(55)	378.06(75)	—
$H_{KJ} \times 10^6$	−8.26627(114)	−7.574(112)	−7.8344(71)	−7.848(19)	—
$H_{JK} \times 10^9$	−8.41(34)	−144.1(294)	—	—	—
$H_J \times 10^9$	5.96632(87)	5.865(191)	6.520(12)	6.548(38)	—
$h_K \times 10^6$	39.393(46)	24.15(353)	38.83(11)	38.29(11)	—
$h_{JK} \times 10^9$	135.401(222)	224.7(327)	144.2(17)	139.3(45)	—
$h_J \times 10^9$	2.23810(37)	2.132(61)	2.3862(41)	2.2454(56)	—
χ_{aa}	−3.7375(69)	—	−3.7823(44)	—	−3.78913(40)
χ_{bb}	—	—	—	—	1.68607(43)
χ_{cc}	—	—	—	—	2.10306(49)
$\chi_{bb} - \chi_{cc}$	−0.7024(160)	—	−0.403(14)	—	−0.41699(92)
σ	0.183	0.045	0.0628*	—	—

(a) Este trabajo, (b) [Cazzoli & Kisiel \(1988\)](#), (c) [Baskakov et al. \(1996\)](#), (d) [De-maison et al. \(1994\)](#), (e) [Colmont et al. \(1997\)](#). En general, todas las constantes calculadas son compatibles con las publicadas en trabajos previos, excepto H_{KJ} , H_{JK} y $\chi_{bb} - \chi_{cc}$, que se desvían de manera importante de las propuestas por otros autores o que parece que presentan valores aleatorios como es el caso de H_{JK} . El parámetro σ es la desviación típica de la nube de la distribución de desviaciones de los valores de $\nu_{\text{exp}} - \nu_{\text{calc}}$. * Valor obtenido como promedio de las desviaciones típicas de diferentes conjuntos de datos utilizados en un mismo ajuste.

importante en la constante H_{JK} . Esta constante es utilizada únicamente en uno de los trabajos publicados ([Cazzoli & Kisiel, 1988](#)), con un valor muy distinto al nuestro. Esto supone que la precisión de esa constante debe ser muy pequeña. Probablemente no tiene apenas importancia en la descripción de los estados rotacionales con la precisión de las frecuencias experimentales de la que disponemos. La variación de la constante H_{KJ} con respecto a las propuestas en trabajos previos es bastante más pequeña, pudiendo ser esta variación una consecuencia del uso de H_{JK} . Las constantes principales *A*, *B* y *C* se alejan igualmente de las propuestas por otros autores en cantidades que en ningún caso superan los 10 kHz. El valor de la constante espectroscópica relativa a la estructura hiperfina cuadrupolar eléctrica producida por el átomo de N, χ_{aa} , es también similar a las propuestas anteriormente. Sin embargo, no ocurre así con la constante $\chi_{bb} - \chi_{cc}$, cuyo módulo es casi dos veces mayor que en trabajos previos.

En cuanto a la estabilidad de las frecuencias obtenidas en el ajuste (ver Figura C.6), parece ser bastante grande. En general los puntos menos estables varían en un factor 2 entre una nube y otra. Excepto en la zona de frecuencias muy pequeñas de la gráfica de la derecha, todos los puntos están lo suficientemente por debajo de la frontera con la zona de calidad aceptable como para suponer que no existen variaciones significativas en las frecuencias predichas al modificar el número de frecuencias experimentales en el conjunto a ajustar. Algunas frecuencias pequeñas pueden verse afectadas por posibles modificacio-

nes en el conjunto de frecuencias experimentales, pero este grupo supone un porcentaje despreciable del total.

C.4.4. CH_2CN

El CH_2CN (radical cianometilo) es una molécula asimétrica prolata. Al contrario que en el resto de las moléculas los desdoblamientos hiperfinos que sufren sus niveles rotacionales son grandes, observándose diferencias entre las frecuencias de las líneas de un multiplete de $\sim 0.1 - 10$ MHz (p.e., [Saito & Yamamoto, 1997](#)). Esta molécula, al ser un radical, tiene una estructura electrónica de capas abiertas con un electrón desapareado. Este hecho, junto con los spines del N y los dos átomos de H, dan lugar a varios mecanismos generadores de estructura hiperfina. Por orden de importancia son:

1. la interacción entre el spin del electrón desapareado con la rotación molecular,
2. la perturbación de la función de onda electrónica producida por la estructura cuadrupolar eléctrica del núcleo del N,
3. la interacción entre el spin del electrón desapareado y el del núcleo del N, y
4. las interacciones entre el spin del electrón desapareado y los núcleos de los átomos de H.

Para ajustar el espectro del CH_2CN hemos tomado las frecuencias experimentales de [Saito & Yamamoto \(1997\)](#) y [Ozeki et al. \(2004\)](#). Así pues, el conjunto de frecuencias a ajustar está formado por 500 frecuencias entre 20 y 261 GHz. Las desviaciones de las frecuencias calculadas con respecto a las experimentales se puede encontrar en la Figura C.7 mientras que la Tabla C.5 contiene las constantes derivadas del ajuste junto con datos de otros trabajos para poder compararlos.

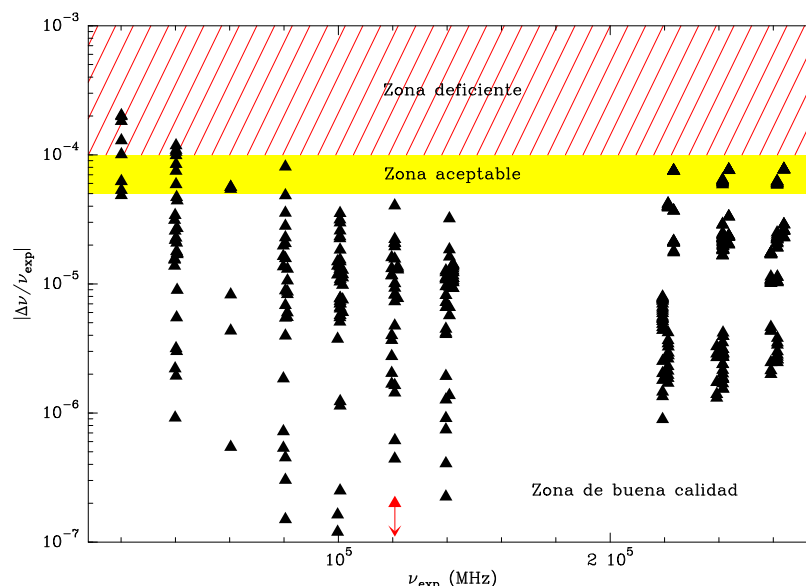


FIGURA C.7.— Desviación relativa del ajuste del CH_2CN . El espectro calculado del CH_2CN no es lo suficientemente bueno como para que todas las desviaciones estén en la zona de buena calidad. Parte de las frecuencias ocupan la zona de calidad aceptable mientras que una pequeña fracción está en la zona de calidad deficiente.

TABLA C.5.— Constantes espectroscópicas del CH₂CN

Constante	Valor (MHz) ^a	Valor (MHz) ^b	Valor (MHz) ^c
<i>A</i>	284981 [†]	284981(115)	284981 [†]
<i>B</i>	10246.93089(152)	10426.765(64)	10246.76582(216)
<i>C</i>	9875.85441(152)	9876.035(65)	9876.02992(216)
Δ_K	23.536 [†]	23.536*	23.536 [†]
$\Delta_{NK} \times 10^3$	427.78(51)	415.73(57)	416.26(85)
$\Delta_N \times 10^3$	3.3923(45)	4.0515(88)	4.063(70)
$\delta_K \times 10^3$	263 [†]	263(33)	263 [†]
$\delta_N \times 10^6$	161.1 [†]	161.1(73)	161.1 [†]
$H_{KN} \times 10^6$	−122.59(217)	−719(49)	−719 [†]
$h_K \times 10^3$	−2.4 [†]	−2.4(20)	−2.4 [†]
$L_{NK} \times 10^9$	—	115(109)	115 [†]
$L_{NKK} \times 10^6$	—	−8.93(68)	−8.93 [†]
ε_{aa}	−655.749(85)	−661.54(30)	−661.537(20)
ε_{bb}	−23.8045(240)	−24.129(69)	−24.1205(132)
ε_{cc}	—	−2.056(67)	−2.0345(132)
$^s\Delta_{KN} \times 10^3$	—	10.5(38)	10.5 [†]
$^s\Delta_K \times 10^3$	—	140(32)	140 [†]
$a_F(H)$	−59.82 [†]	−59.82(30)	−59.630(33)
$T_{aa}(H)$	—	−15.891(70)	−15.9006(68)
$T_{bb}(H)$	—	10(24)	14.6(67)
$a_F(N)$	7.809(32)	9.513(63)	9.4866(37)
$T_{aa}(N)$	−27.697(47)	−15.671(98)	−15.6386(73)
$T_{bb}(N)$	−27.165(51)	−12.77(130)	−12.4519(96)
$\chi_{aa}(N)$	−6.914(66)	−4.182(98)	−4.1950(89)
$\chi_{bb}(N)$	2.1 [†]	2.1*	1.8327(131)
$C_{aa}(N) \times 10^3$	—	—	27.3(70)
$C_{bb}(N) \times 10^3$	—	—	2.9(23)
σ	1.865		

(a) Este trabajo, (b) Saito & Yamamoto (1997), (c) Ozeki et al. (2004). Las constantes derivadas en este caso son peores que en los anteriores debido a la mayor dificultad existente en el proceso de ajuste. De hecho, ha sido necesario fijar varias constantes a los valores obtenidos por Saito & Yamamoto (1997) (señaladas con el símbolo †) para poder conseguir un ajuste aceptable con constantes parecidas a las ya publicadas. Incluso así muchas constantes de las obtenidas son claramente diferentes de las de trabajos previos, aunque parece que dichas diferencias mejoran la calidad de los ajustes. Las constantes señaladas con el símbolo * han sido fijadas por Saito & Yamamoto (1997) a partir de similitudes entre el CH₂CN y otras moléculas para facilitar el ajuste.

En este caso, al contrario que en los anteriores, no ha sido posible conseguir un ajuste lo suficientemente bueno como para que todas las desviaciones ε estén en la zona de buena calidad. El 1.8 % de los puntos son deficientes; el 12.4 % aceptables y el 85.8 % buenos. Durante el ajuste hemos tenido que rechazar 55 líneas (algo más del 10 % de las frecuencias iniciales), la mayor parte de la zona de frecuencias pequeñas. Los multipletes experimentales están bien resueltos a frecuencias pequeñas mientras que a frecuencias grandes no es posible detectar los desdoblamientos, posiblemente por falta de resolución espectral. El ajuste del conjunto completo de frecuencias de tal modo que la calidad de las frecuencias calculadas sea buena es difícil de conseguir. De hecho, el ajuste de las frecuencias pequeñas realizado

por Ozeki et al. (2004) tampoco proporciona frecuencias calculadas con $\varepsilon < 5 \times 10^{-5}$ en una cantidad apreciable de las frecuencias. Saito & Yamamoto (1997) sí consiguen buenos ajustes tratando por separado las líneas con $I(H) = 0$ e $I(H) = 1$ mediante un programa de ajuste propio. Desafortunadamente, a nosotros no nos es posible actualmente desarrollar ese tipo de programas, obteniendo necesariamente resultados peores que estos últimos autores.

El conjunto de constantes espectroscópicas usado es menor que el utilizado por Saito & Yamamoto (1997) y Ozeki et al. (2004) porque la adición de más constantes degrada las utilizadas apartándolas incluso más de las obtenidas en estudios previos. La fijación de la constante A ha sido necesaria puesto que las transiciones consideradas no permiten una buena determinación de su valor. Cualquier variación producida por el programa de ajuste en las constantes principales afecta en gran medida al resto pudiendo hacer que el proceso de ajuste diverja. Igualmente, y en vista de la dificultad del ajuste, hemos decidido fijar todas las constantes relativas a contribuciones al Hamiltoniano de Watson que contengan únicamente potencias de K (Δ_K , δ_K y h_K). Además, hemos fijado también las constantes δ_N , $a_F(H)$ y $\chi_{bb}(N)$ para conseguir que el resto no se separen mucho de las ya publicadas. Otras como H_{KN} se diferencian bastante de los valores propuestos por Saito & Yamamoto (1997) y Ozeki et al. (2004). Probablemente los problemas aparecidos durante el ajuste sean consecuencia de la gran complejidad de la estructura energética molecular introducida por la estructura hiperfina.

No obstante, si bien las constantes obtenidas no coinciden con las publicadas, la mayor parte de las frecuencias calculadas está en la zona de buena calidad habiendo utilizado para el ajuste un número adecuado de constantes. Es por ello muy posible que las frecuencias calculadas sean próximas a las reales. Para completar este estudio es necesario estudiar la estabilidad de las frecuencias calculadas (ver Figura C.8).

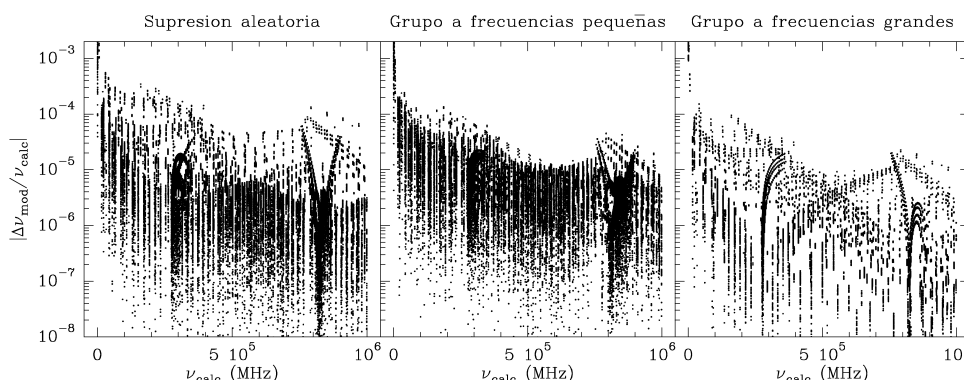


FIGURA C.8.— Estudio de estabilidad de las frecuencias calculadas (CH_2CN). Para conocer el significado de las gráficas y los estudios que representa cada una, léase la nota de la Figura C.2 y el texto. Las frecuencias calculadas parecen lo suficientemente estables como para no sufrir grandes modificaciones al añadir más frecuencias experimentales al conjunto inicial. La supresión aleatoria es el proceso que parece generar más inestabilidad mientras que los otros dos dan lugar a comportamientos similares, siendo únicamente las frecuencias por debajo de 30 GHz las susceptibles de pasar de la zona de buena calidad a las zonas de calidad aceptable o deficiente. Por encima de 40 GHz, todas las frecuencias modificadas están en la zona de buena calidad o calidad aceptable.

Las gráficas de esta Figura sugieren que las frecuencias calculadas son estables con respecto a la adición o supresión de frecuencias experimentales del conjunto a ajustar. Pero no todas las frecuencias calculadas son lo suficientemente precisas como para poder utilizarlas en identificaciones de líneas moleculares: la región por debajo de 40 GHz contiene muchas frecuencias que se desvían significativamente de las calculadas mediante el mejor ajuste.

Por lo tanto, las frecuencias calculadas en ese rango con el mejor ajuste podrían variar significativamente al añadir más frecuencias experimentales al conjunto a ajustar, no siendo fiables. Por el contrario las frecuencias calculadas por encima de 40 GHz son más estables pudiendo ser utilizadas en procesos de identificación.

C.5. Conclusiones

En este Apéndice hemos tratado de ajustar los espectros de cuatro especies moleculares: una simétrica (CH₃CCH) y tres asimétricas (H₂CS, CH₂CHCN y CH₂CN). De las tres últimas, dos de ellas (CH₂CHCN y CH₂CN) presentan estructura hiperfina, lo que complica el proceso de ajuste especialmente en el caso del CH₂CN. El objetivo de estos ajustes es obtener frecuencias de líneas de esas especies desconocidas experimentalmente que nos puedan ayudar a identificar líneas moleculares en espectros de nubes moleculares, principalmente envolturas circunestelares.

Considerando que la expansión de las envolturas circunestelares se produce a velocidades $\gtrsim 10 \text{ km s}^{-1}$ y que suele producirse en todas direcciones, las anchuras de línea esperadas $\geq 20 \text{ km s}^{-1}$. Por lo tanto, las frecuencias que disten del centro de la línea $\lesssim 15 \text{ km s}^{-1}$ pueden ser tomadas como de buena calidad. En consecuencia, el objetivo de los ajustes es el de obtener la mayor cantidad de frecuencias de buena calidad para poder utilizarlas en procesos de identificación de líneas moleculares.

Todos los ajustes realizados en este Apéndice cumplen en un grado mayor o menor la condición impuesta sobre las desviaciones relativas de las frecuencias calculadas. De hecho, los mejores ajustes en cuanto a la calidad de las frecuencias calculadas y su estabilidad parecen ser los del CH₃CCH y del CH₂CHCN. Prácticamente todas las líneas predichas por los ajustes para estas moléculas parecen ser lo suficientemente precisas como para identificar líneas desconocidas. El espectro de la molécula peor ajustado es el del CH₂CN aunque la gran dificultad existente en el tratamiento de dicha molécula hace que incluso este ajuste sea suficientemente bueno para utilizar en procesos de detección. El caso del H₂CS es el único en el que claramente han faltado frecuencias experimentales para ajustar. El ajuste del espectro tiene la calidad buscada pero el estudio de estabilidad produce desconfianza en las frecuencias predichas.

Es interesante hacer notar el comportamiento general de las representaciones de las desviaciones relativas de las frecuencias calculadas por medio del mejor ajuste con respecto a las frecuencias experimentales. En todos los casos (incluso en el caso del CH₃CCH, aunque no sea tan obvio como en el resto) el límite superior de la nube parece decrecer con la frecuencia. Esto implica que en general las desviaciones son aproximadamente constantes en todo el rango de frecuencias. Esta es la razón de que en todos los ajustes las líneas con frecuencias pequeñas sean las peor ajustadas llegando incluso, en el caso del CH₂CN, a no cumplir la condición impuesta. Este hecho podría complicar la identificación de líneas moleculares a frecuencias pequeñas puesto que la anchura de una línea depende linealmente de su frecuencia.

Conseguir un buen ajuste del espectro de una especie molecular es relativamente sencillo cuando las moléculas no sufren interacciones internas y el número de líneas experimentales es suficientemente grande. Desafortunadamente, ésta no siempre es la situación general y conseguir un buen ajuste con el que predecir frecuencias no observadas puede llevarnos a falsas identificaciones como consecuencia de falta de información experimental o una mala elección en el proceso de ajuste. Es entonces conveniente no excederse en los objetivos a cumplir y tratar de ajustar las regiones del espectro mejor caracterizadas con la esperanza de ampliar de ese modo el conjunto de frecuencias experimentales y poder aplicar la nueva información posteriormente a otras regiones menos estudiadas.

TABLA C.6.– Frecuencias ajustadas de CH₃CCH, H₂CS, CH₂CHCN y CH₂CN

$N^u K_a^u K_c^u N^l K_a^l K_c^l$				ν_{exp}	ν_{calc}	$\Delta\nu$	$N^u K_a^u K_c^u J^u F_1^u F^u N^l K_a^l K_c^l J^l F_1^l F^l$				ν_{exp}	ν_{calc}	$\Delta\nu$								
CH ₃ CCH							CH ₂ CHCN														
3	1	2	1	51273.98000	51273.96875	0.01125	1	0	1	1	0	0	0	1	9484.08400	9484.08946	-0.00546				
3	0	2	0	51274.94700	51274.94922	-0.00222	1	0	1	2	0	0	0	1	9485.22250	9485.21000	0.01250				
4	3	3	3	68354.49800	68354.51563	-0.01762	2	0	2	2	1	0	1	2	18965.39530	18965.39539	-0.00009				
6	2	5	2	102540.14500	102540.15630	-0.01125	2	1	1	2	1	1	0	1	19426.67690	19426.67188	0.00502				
6	1	5	1	102546.02400	102546.03130	-0.00725	2	1	1	1	1	1	0	0	19429.09600	19429.09028	0.00572				
6	0	5	0	102547.98400	102547.99220	-0.00819	2	1	2	2	1	1	1	1	18512.12951	18512.12951	0.00349				
7	5	6	5	119581.16800	119581.17190	-0.00388	2	1	2	3	3	0	3	4	15982.39030	15982.38722	0.00308				
7	4	6	4	119601.72600	119601.71090	0.01506	3	1	3	4	4	0	4	5	5844.96690	5844.97369	-0.00679				
7	2	6	2	119629.10000	119629.11720	-0.01719	28	2	26	29	28	2	27	29	70207.66500	70207.67285	-0.00785				
7	0	6	0	119638.24400	119638.25780	-0.01381	18	1	17	18	17	2	16	17	71903.82600	71903.81523	0.01077				
8	2	7	2	136717.56000	136717.57810	-0.01812	27	2	25	27	26	3	24	26	74149.61600	74149.62709	-0.01109				
8	1	7	1	136725.39700	136725.40630	-0.00925	8	5	3	7	7	5	2	6	75926.91300	75926.89946	0.01354				
13	0	12	0	222166.97000	222166.98440	-0.01438	8	6	3	7	7	6	2	6	75937.99500	75938.00755	-0.01255				
14	0	13	0	239252.29700	239252.31250	-0.01550	47	4	43	47	46	5	42	46	77479.93000	77479.94018	-0.01018				
20	0	19	0	341741.02000	341741.03130	-0.01125	55	4	51	54	55	4	52	54	82455.10900	82455.10173	0.00727				
31	3	30	3	529403.91900	529403.93750	-0.01850	19	1	18	19	18	2	17	18	85097.23500	85097.22380	0.01120				
32	16	31	16	543925.25400	543925.25000	0.00400	9	7	3	8	8	7	2	7	85447.89000	85447.89774	-0.00774				
33	2	32	2	563562.74000	563562.75000	-0.01000	70	5	65	71	70	5	66	71	92471.89600	92471.89198	0.00402				
34	15	33	15	578206.81800	578206.81250	0.00550	10	7	3	9	9	7	2	8	94942.63000	94942.61883	0.01117				
36	13	35	13	612805.12700	612805.12500	0.00200	10	9	2	9	9	9	0	8	94991.77400	94991.78701	-0.01301				
36	3	35	3	614650.23000	614650.25000	-0.02000	57	4	53	57	57	4	54	57	100751.31400	100751.31620	-0.00221				
36	1	35	1	614742.98300	614743.00000	-0.01700	11	8	3	10	10	8	2	9	104461.60000	104461.59160	0.00839				
41	1	40	1	699938.44100	699938.43750	0.00350	11	9	3	10	10	9	2	9	104490.48100	104490.47740	0.00362				
41	0	40	0	699951.55700	699951.56250	-0.00550	21	1	20	21	20	2	19	20	111793.92300	111793.91320	0.00984				
42	10	41	10	715640.76300	715640.75000	0.01300	20	4	17	21	21	3	18	22	113093.99700	113094.00540	-0.00841				
42	9	41	9	715895.04500	715895.06250	-0.01750	21	2	19	21	21	1	20	21	113501.80900	113501.80140	0.00762				
42	4	41	4	716767.29400	716767.31250	-0.01850	22	2	20	22	22	1	21	22	114120.96900	114120.97570	-0.00667				
42	0	41	0	716982.55300	716982.56250	-0.00950	20	4	16	19	21	3	19	20	115287.66600	115287.66960	-0.00356				
45	9	44	9	766895.63500	766895.62500	0.01000	20	4	16	21	21	3	19	22	115287.66600	115287.67030	-0.00430				
45	8	44	8	767138.98400	767139.00000	-0.01600	16	7	10	15	15	7	9	14	151915.86800	151915.86290	0.00515				
45	6	44	6	767540.37100	767540.37500	-0.00400	16	8	9	15	15	8	8	14	151944.55000	151944.56480	-0.01476				
45	1	44	1	768043.11100	768043.12500	-0.01400	16	8	9	17	15	8	8	16	151944.55000	151944.55790	-0.00785				
45	0	44	0	768057.49300	768057.50000	-0.00700	33	2	32	32	32	1	31	31	350864.95800	350864.97110	-0.01308				
48	9	47	9	817868.31200	817868.31250	-0.00050	33	2	32	34	32	1	31	33	350864.95800	350864.97060	-0.01264				
48	6	47	6	818553.94300	818553.93750	0.00550	47	13	35	46	46	13	34	45	446578.00300	446577.98920	0.01378				
48	0	47	0	819103.85500	819103.87500	-0.02000	29	3	27	30	28	2	26	29	453036.87900	453036.88780	-0.00880				
H ₂ CS							CH ₂ CN														
2	1	1	2	3139.38000	3139.39076	-0.01076	2	1	2	5/2	3/2	3/2	1	1	1	3/2	3/2	3/2	39916.66660	39916.75485	-0.08825
3	1	2	3	6278.65000	6278.60275	0.04725	2	1	2	5/2	7/2	7/2	1	1	1	3/2	5/2	5/2	39927.83590	39927.87254	-0.03664
15	2	13	15	7052.07000	7052.04061	0.02939	2	0	2	5/2	7/2	9/2	1	0	1	3/2	5/2	7/2	40240.00450	40239.92636	0.07814
16	2	14	16	9050.16000	9050.12008	0.03992	2	1	1	3/2	3/2	3/2	1	1	0	1/2	3/2	3/2	40453.69970	40453.47751	0.22219
4	1	3	4	10463.97000	10463.92419	0.04581	2	1	1	3/2	3/2	3/2	1	1	0	1/2	1/2	1/2	40477.29170	40477.17002	0.12168
17	2	15	17	11438.53000	11438.52204	0.00796	2	1	1	5/2	7/2	7/2	1	1	0	3/2	5/2	5/2	40659.89600	40660.26083	-0.36483
18	2	16	18	12421.90000	12426.87301	0.02699	3	0	3	7/2	9/2	11/2	2	0	2	5/2	7/2	9/2	60360.75050	60361.01207	-0.26157
5	1	4	5	15695.12000	15695.07083	0.04917	3	0	3	5/2	7/2	9/2	2	0	2	3/2	5/2	7/2	60369.68860	60369.72146	-0.03286
19	2	17	19	17565.92000	17565.96936	-0.04936	4	0	4	7/2	9/2	11/2	3	0	3	5/2	7/2	9/2	80490.26100	80490.24892	0.01208
20	2	18	20	21397.44000	21397.41120	0.02880	4	0	4	7/2	9/2	7/2	3	0	3	5/2	7/2	5/2	80491.26300	80491.28732	-0.02432
6	1	5	6	21971.71000	21971.64768	0.06232	4	0	4	7/2	5/2	7/2	3	0	3	5/2	3/2	5/2	80491.26300	80490.94422	0.31878
21	2	19	21	25803.14000	25803.20427	-0.06427	4	1	4	9/2	7/2	7/2	3	1	3	7/2	5/2	5/2	79759.15500	79759.19775	-0.04275
7	1	6	7	29293.21000	29293.12257	0.08743	4	1	4	9/2	9/2	9/2	3	1	3	7/2	7/2	7/2	79759.78800	79759.64063	0.14737
22	2	20	22	30830.35000	30830.33639	0.01361	5	0	5	9/2	11/2	13/2	4	0	4	7/2	9/2	11/2	100608.83200	100608.85720	-0.02517
1	0	1	0	34351.43000	34351.43234	-0.00234	5	0	5	9/2	7/2	5/2	4	0	4	7/2	5/2	3/2	100610.15200	100610.26640	-0.11444
23	2	21	23	36525.32000	36525.33629	-0.01629	5	1	5	11/2	9/2	9/2	4	1	4	9/2	7/2	7/2	99689.12100	99689.10907	0.01193
8	1	7	8	37658.83000	37658.79454	0.03546	5	1	5	11/2	13/2	13/2	4	1	4	9/2	11/2	11/2	99689.83300	99689.81676	0.01624
24	2	22	24	42933.80000	42933.82467	-0.02467	5	1	5	11/2	11/2	11/2	4	1	4	9/2	9/2	9/2	99689.83300	99689.45982	0.37318
9	1	8	9	47067.73000	47067.75697	-0.02697	6	0	6	11/2	11/2	11/2	5	0	5	9/2	9/2	9/2	120723.75300	120723.5797	0.17327
25	2	23	25	50100.07000	50100.06864	0.00136	6	0	6	11/2	13/2	15/2	5	0	5	9/2	11/2	13/2	120725.06000	120725.11340	-0.05338
10	1	9	10	57518.80000	57518.85555	-0.05555	6	0	6	11/2	9/2	7/2	5	0	5	9/2	7/2	5/2	120726.17600	120726.37400	-0.19795
26	2	24	26	58066.56000	58066.55110	0.00890	6	1	6	11/2	13/2	15/2	5	1	5						

Esta Tabla contiene una muestra de los ajustes realizados a los datos de las moléculas CH₃CCH, H₂CS, CH₂CHCN y CH₂CN. El gran número de frecuencias utilizadas durante

Apéndice D

Cuaderno de laboratorio

D.1. Expansión de 2000 mbar

FECHAS DE LOS EXPERIMENTOS:

- 13/12/05: Poblaciones
- 14,15/12/05: Densidades absolutas
- 15,16/12/05: Densidades relativas

DATOS REFERENTES A LOS EXPERIMENTOS:

Diámetro de tobera: 313 μm

Presión en precámara medido con el Sensotec:

- Poblaciones: 1054(4) mbar
- Densidades absolutas [14/12/05]: 1053.5–1058.0 mbar
[15/12/05]: 1059–1060 mbar
- Densidades relativas [15/12/05]: 1057(4) mbar
[16/12/05]: 1054(4) mbar (no tengo el error pero tomo el mismo que para el día anterior)

Presión atmosférica medida con el barómetro del Rocasolano:

- Poblaciones: 945.75(0.05) mbar
- Densidades absolutas [14/12/05]: 943.40(0.20) mbar
[15/12/05]: 942.65(0.05) mbar
- Densidades relativas [15/12/05]: 942.65(0.05) mbar
[16/12/05]: 946.35(0.05) mbar

Temperatura de precámara:

- Poblaciones: 297.0(0.5) K
- Densidades absolutas [14/12/05]: 296.5(0.5) K
[15/12/05]: 297.0(0.5) K
- Densidades relativas [15/12/05]: 297.0(0.5) K
[16/12/05]: 298.0(0.5) K

Potencia de láser: 5.8W@514.5nm

Ángulo de la lámina de semionda:

- Poblaciones: 132.2°
- Densidades absolutas [14/12/05]: 87.6°
[15/12/05]: 82.5°
- Densidades relativas [15/12/05]: 82.5°
[16/12/05]: 82.5° (no la toqué desde el día anterior)

CONDICIONES EXPERIMENTALES:

- Poblaciones:
 - 50–200 μm -> S=50 μm x1mm, Agrup=5x20, T=10s, Con pantalla
 - 250–300 μm -> S=50 μm x1mm, Agrup=5x60, T=10s, Sin pantalla
 - 400–500 μm -> S=50 μm x1mm, Agrup=5x74, T=10s
 - 600–700 μm -> S=50 μm x2mm, Agrup=5x100, T=10s
 - 800–900 μm -> S=50 μm x2mm, Agrup=5x148, T=10s
 - 1000–1250 μm -> S=100 μm x5mm, Agrup=5x200, T=10s
 - 1500–2000 μm -> S=150 μm x5mm, Agrup=5x300, T=10s
 - 2250–3500 μm -> S=150 μm x5mm, Agrup=5x370, T=10s
 - 3750–5000 μm -> S=150 μm x5mm, Agrup=5x370, T=30s
 - 5500–14000 μm -> S=150 μm x5mm, Agrup=5x370, T=60s
 - 14500–19500 μm -> S=150 μm x5mm, Agrup=5x370, T=60s(S es la rendija de entrada al monocromador)
- Densidades absolutas: Medidas hechas a 300, 900, 3000, 6000, 9000, 12000,

15000 y 18000 um.

- Densidades relativas:

[15/12/05]

50-200um -> S=50umx1mm, Agrup=5x20, T=10s, Con pantalla

200-400um -> S=50umx1mm, Agrup=5x40, T=10s, Sin pantalla

400-600um -> S=50umx1mm, Agrup=5x74, T=10s

600-800um -> S=50umx2mm, Agrup=5x100, T=10s

800-1000um -> S=50umx2mm, Agrup=5x148, T=10s

1000-1500um -> S=100umx5mm, Agrup=5x200, T=10s

1500-2000um -> S=150umx5mm, Agrup=5x250, T=10s

2000-2500um -> S=150umx5mm, Agrup=5x300, T=10s

2500-3000um -> S=150umx5mm, Agrup=5x400, T=10s

3000-5000um -> S=150umx5mm, Agrup=5x370, T=30s

5000-13000um -> S=150umx5mm, Agrup=5x370, T=60s

[16/12/05]

13500-18500um -> S=150umx5mm, Agrup=5x370, T=60s

Comentarios:

Durante la sesión de medida de poblaciones hubo un intervalo de 1.5h entre el final de la serie 5500-14000um y el principio de 14500-19500um, durante el cual se cerró el chorro de gas. Al comenzar de nuevo con el experimento, la presión en precámara se mantuvo pero la presión residual en la cámara bajó de 0.15mbar a 0.135mbar. Puede que haya habido alguna variación en el cero del baratrón.

z micras A	P00exp adim B	P00fit adim C	P00exp-P00fit adim D	dP00fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP00fit/dt sec-1 G
50.	0.02482(0.00172)	0.02512	-0.00030	51.8(0.0)	470.1	24328.(0.)
100.	0.02718(0.00019)	0.02776	-0.00058	53.7(0.9)	523.2	28112.(454.)
150.	0.03061(0.00160)	0.03050	0.00011	55.7(0.9)	566.9	31576.(522.)
200.	0.03564(0.00153)	0.03333	0.00231	57.7(1.3)	599.3	34568.(753.)
250.	0.03568(0.00056)	0.03626	-0.00058	59.6(5.8)	620.3	37001.(3616.)
300.	0.03843(0.00018)	0.03944	-0.00101	61.0(6.8)	637.2	38863.(4344.)
400.	0.04566(0.00190)	0.04563	0.00003	62.6(4.4)	662.7	41498.(2939.)
500.	0.05188(0.00112)	0.05231	-0.00043	64.3(2.6)	680.8	43775.(1776.)
600.	0.06000(0.00139)	0.05940	0.00060	66.1(3.0)	694.1	45894.(2050.)
700.	0.06559(0.00092)	0.06600	-0.00041	64.7(3.7)	704.3	45561.(2609.)
800.	0.07299(0.00176)	0.07189	0.00110	63.5(4.5)	712.3	45217.(3175.)
900.	0.07846(0.00350)	0.07843	0.00003	62.5(2.9)	718.8	44947.(2105.)
1000.	0.08402(0.00102)	0.08466	-0.00064	60.8(1.7)	724.2	43995.(1262.)
1250.	0.09822(0.00135)	0.09941	-0.00119	58.7(2.4)	734.3	43096.(1785.)
1500.	0.11591(0.00251)	0.11398	0.00193	56.4(2.1)	741.5	41784.(1591.)
1750.	0.12725(0.00160)	0.12799	-0.00074	54.1(2.0)	746.8	40372.(1511.)
2000.	0.14039(0.00148)	0.14127	-0.00088	51.3(1.5)	750.9	38499.(1139.)
2250.	0.15461(0.00120)	0.15358	0.00103	48.8(1.2)	754.1	36793.(929.)
2500.	0.16524(0.00030)	0.16468	0.00056	47.0(1.5)	756.8	35547.(1161.)
2750.	0.17618(0.00265)	0.17624	-0.00006	46.4(2.6)	759.0	35210.(1986.)
3000.	0.18632(0.00157)	0.18772	-0.00140	44.5(2.6)	760.8	33840.(2005.)
3250.	0.19768(0.00278)	0.19855	-0.00087	43.0(2.0)	762.4	32791.(1558.)
3500.	0.21087(0.00504)	0.20984	0.00103	41.2(1.9)	763.7	31449.(1487.)
3750.	0.22155(0.00138)	0.22006	0.00149	39.7(2.0)	764.9	30344.(1500.)
4000.	0.22881(0.00066)	0.22956	-0.00075	38.5(1.7)	766.0	29453.(1275.)
4250.	0.23941(0.00148)	0.23854	0.00087	36.6(1.6)	766.9	28046.(1206.)
4500.	0.24503(0.00253)	0.24710	-0.00207	34.6(1.5)	767.8	26589.(1154.)
4750.	0.25555(0.00153)	0.25599	-0.00044	33.7(1.6)	768.5	25891.(1247.)
5000.	0.26556(0.00288)	0.26428	0.00128	33.3(1.2)	769.2	25622.(908.)
5500.	0.28037(0.00151)	0.28064	-0.00027	31.1(1.3)	770.4	23983.(1015.)
6000.	0.29627(0.00307)	0.29560	0.00067	29.2(1.3)	771.4	22548.(1006.)
6500.	0.30814(0.00372)	0.30933	-0.00119	26.7(0.5)	772.3	20605.(354.)
7000.	0.32317(0.00405)	0.32192	0.00125	24.6(0.3)	773.1	19057.(269.)
7500.	0.33280(0.00428)	0.33319	-0.00039	23.8(1.1)	773.8	18424.(870.)
8000.	0.34538(0.00231)	0.34497	0.00041	21.9(1.1)	774.3	16957.(828.)
8500.	0.35434(0.00410)	0.35578	-0.00144	20.5(1.0)	774.9	15901.(780.)
9000.	0.36423(0.00720)	0.36566	-0.00143	18.7(0.9)	775.3	14514.(685.)
9500.	0.37930(0.00701)	0.37462	0.00468	17.9(1.6)	775.7	13870.(1206.)
10000.	0.38120(0.00473)	0.38282	-0.00162	16.8(1.2)	776.1	13031.(914.)
10500.	0.39058(0.00628)	0.39102	-0.00044	15.7(1.1)	776.4	12221.(878.)
11000.	0.39605(0.00472)	0.39871	-0.00266	14.0(0.8)	776.7	10850.(622.)
11500.	0.40651(0.00787)	0.40433	0.00218	13.4(0.7)	777.0	10396.(516.)
12000.	0.41343(0.00791)	0.41168	0.00175	13.5(1.7)	777.3	10509.(1306.)
12500.	0.41819(0.00584)	0.41786	0.00033	13.0(2.0)	777.5	10131.(1552.)
13000.	0.41971(0.01001)	0.42417	-0.00446	12.9(1.8)	777.7	10009.(1383.)
13500.	0.43261(0.00735)	0.43040	0.00221	11.9(1.3)	777.9	9249.(982.)
14000.	0.43634(0.01067)	0.43773	-0.00139	9.9(2.3)	778.0	7714.(1798.)
14500.	0.44349(0.00597)	0.44253	0.00096	9.4(2.5)	778.2	7343.(1950.)
15000.	0.44981(0.00436)	0.44670	0.00311	8.9(2.4)	778.3	6947.(1843.)
15500.	0.45159(0.01599)	0.44969	0.00190	7.2(2.4)	778.5	5613.(1880.)
16000.	0.44497(0.00769)	0.45224	-0.00727	7.7(2.7)	778.6	5977.(2098.)
16500.	0.45716(0.01377)	0.45615	0.00101	6.6(2.2)	778.7	5165.(1735.)
17000.	0.46190(0.01495)	0.46074	0.00116	4.8(2.2)	778.8	3734.(1730.)
17500.	0.46189(0.00637)	0.46343	-0.00154	4.9(2.4)	778.9	3831.(1903.)

18000.	0.47267(0.01634)	0.46549	0.00718	3.3(4.1)	779.0	2564.(3190.)
18500.	0.46671(0.01927)	0.46672	-0.00001	1.7(3.6)	779.1	1296.(2827.)
19000.	0.45940(0.00813)	0.46715	-0.00775	0.0(0.4)	779.2	27.(284.)
19500.	0.47019(0.01264)	0.46676	0.00343	-1.6(0.0)	779.3	-1241.(0.)

z micras A	P01exp adim B	P01fit adim C	P01exp-P01fit adim D	dP01fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP01fit/dt sec-1 G
50.	0.03417(0.00283)	0.03303	0.00114	89.7(0.0)	470.1	42168.(0.)
100.	0.03630(0.00063)	0.03750	-0.00120	89.3(5.1)	523.2	46727.(2666.)
150.	0.04108(0.00301)	0.04196	-0.00088	88.9(4.2)	566.9	50409.(2382.)
200.	0.04782(0.00331)	0.04640	0.00142	88.5(3.3)	599.3	53056.(1982.)
250.	0.05000(0.00104)	0.05081	-0.00081	88.1(2.8)	620.3	54667.(1723.)
300.	0.05465(0.00074)	0.05550	-0.00085	90.8(2.1)	637.2	57845.(1320.)
400.	0.06550(0.00114)	0.06415	0.00135	86.4(1.6)	662.7	57264.(1071.)
500.	0.07204(0.00178)	0.07265	-0.00061	82.6(1.8)	680.8	56234.(1198.)
600.	0.08108(0.00171)	0.08094	0.00014	81.1(2.4)	694.1	56264.(1637.)
700.	0.08827(0.00023)	0.08865	-0.00038	77.9(2.0)	704.3	54858.(1374.)
800.	0.09686(0.00154)	0.09622	0.00064	74.3(1.1)	712.3	52931.(797.)
900.	0.10309(0.00242)	0.10375	-0.00066	73.1(1.5)	718.8	52566.(1054.)
1000.	0.11083(0.00081)	0.11055	0.00028	69.5(1.2)	724.2	50339.(861.)
1250.	0.12783(0.00082)	0.12732	0.00051	64.4(1.0)	734.3	47296.(741.)
1500.	0.14279(0.00218)	0.14257	0.00022	59.2(1.7)	741.5	43875.(1245.)
1750.	0.15580(0.00306)	0.15712	-0.00132	54.0(1.8)	746.8	40357.(1331.)
2000.	0.17057(0.00210)	0.16975	0.00082	49.0(1.4)	750.9	36809.(1033.)
2250.	0.18135(0.00103)	0.18114	0.00021	44.7(1.7)	754.1	33738.(1279.)
2500.	0.19275(0.00054)	0.19150	0.00125	41.3(2.9)	756.8	31248.(2174.)
2750.	0.19952(0.00552)	0.20147	-0.00195	37.0(2.4)	759.0	28098.(1812.)
3000.	0.20953(0.00319)	0.20980	-0.00027	33.4(1.7)	760.8	25380.(1261.)
3250.	0.21813(0.00403)	0.21760	0.00053	31.0(1.3)	762.4	23604.(1001.)
3500.	0.22684(0.00311)	0.22455	0.00229	29.5(1.7)	763.7	22506.(1333.)
3750.	0.22983(0.00250)	0.23191	-0.00208	28.0(2.7)	764.9	21432.(2040.)
4000.	0.23762(0.00404)	0.23850	-0.00088	25.7(1.8)	766.0	19709.(1370.)
4250.	0.24430(0.00117)	0.24487	-0.00057	23.7(1.6)	766.9	18199.(1204.)
4500.	0.25270(0.00256)	0.25076	0.00194	22.1(2.1)	767.8	16953.(1615.)
4750.	0.25644(0.00421)	0.25621	0.00023	21.2(2.8)	768.5	16315.(2123.)
5000.	0.26073(0.00464)	0.26071	0.00002	18.6(2.4)	769.2	14284.(1872.)
5500.	0.26881(0.00428)	0.26858	0.00023	14.9(1.3)	770.4	11487.(1035.)
6000.	0.27496(0.00092)	0.27465	0.00031	12.3(1.2)	771.4	9511.(895.)
6500.	0.28040(0.00349)	0.28022	0.00018	11.0(2.1)	772.3	8511.(1626.)
7000.	0.28507(0.00295)	0.28512	-0.00005	9.9(1.9)	773.1	7668.(1467.)
7500.	0.28885(0.00531)	0.28973	-0.00088	8.7(1.5)	773.8	6703.(1189.)
8000.	0.29389(0.00391)	0.29379	0.00010	7.8(1.2)	774.3	6050.(931.)
8500.	0.29780(0.00763)	0.29791	-0.00011	6.4(0.6)	774.9	4993.(465.)
9000.	0.30180(0.00525)	0.30042	0.00138	6.1(0.5)	775.3	4736.(356.)
9500.	0.30275(0.00450)	0.30276	-0.00001	6.1(1.2)	775.7	4694.(910.)
10000.	0.30620(0.00123)	0.30546	0.00074	5.5(1.3)	776.1	4301.(996.)
10500.	0.30395(0.00665)	0.30849	-0.00454	4.8(2.0)	776.4	3696.(1523.)
11000.	0.31217(0.00253)	0.31086	0.00131	4.4(1.3)	776.7	3421.(974.)
11500.	0.31635(0.00662)	0.31360	0.00275	3.9(1.2)	777.0	3001.(949.)
12000.	0.31606(0.00758)	0.31488	0.00118	4.0(1.7)	777.3	3112.(1332.)
12500.	0.31451(0.00294)	0.31771	-0.00320	2.8(1.5)	777.5	2160.(1149.)
13000.	0.31799(0.00744)	0.31797	0.00002	1.1(1.3)	777.7	844.(1007.)
13500.	0.31662(0.01387)	0.31809	-0.00147	0.4(1.0)	777.9	286.(760.)
14000.	0.32427(0.00654)	0.31762	0.00665	1.3(2.0)	778.0	996.(1527.)
14500.	0.31509(0.00855)	0.31817	-0.00308	1.7(2.6)	778.2	1339.(1988.)
15000.	0.31662(0.01093)	0.31872	-0.00210	1.6(2.3)	778.3	1217.(1774.)
15500.	0.31683(0.00219)	0.31999	-0.00316	1.5(2.9)	778.5	1176.(2269.)
16000.	0.32499(0.01373)	0.31989	0.00510	2.3(1.8)	778.6	1798.(1380.)
16500.	0.32397(0.01307)	0.32289	0.00108	3.6(0.7)	778.7	2810.(578.)
17000.	0.32341(0.00634)	0.32494	-0.00153	3.1(1.0)	778.8	2410.(792.)
17500.	0.32206(0.01687)	0.32725	-0.00519	1.3(2.5)	778.9	982.(1920.)
18000.	0.33118(0.00921)	0.32745	0.00373	-0.5(4.0)	779.0	-380.(3106.)
18500.	0.32901(0.01469)	0.32677	0.00224	-2.2(2.5)	779.1	-1743.(1980.)
19000.	0.32808(0.01540)	0.32521	0.00287	-4.0(2.4)	779.2	-3106.(1898.)
19500.	0.31951(0.01512)	0.32278	-0.00327	-5.7(0.0)	779.3	-4469.(0.)

z micras A	P02exp adim B	P02fit adim C	P02exp-P02fit adim D	dP02fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP02fit/dt sec-1 G
50.	0.10332(0.00136)	0.10115	0.00217	244.8(0.0)	470.1	115080.(0.)
100.	0.11231(0.00465)	0.11329	-0.00098	240.7(8.5)	523.2	125934.(4464.)
150.	0.12274(0.00401)	0.12522	-0.00248	236.5(12.8)	566.9	134072.(7239.)
200.	0.13936(0.00229)	0.13694	0.00242	232.4(10.3)	599.3	139277.(6173.)
250.	0.14625(0.00126)	0.14846	-0.00221	228.2(10.1)	620.3	141552.(6240.)
300.	0.15790(0.00231)	0.16020	-0.00230	229.8(5.2)	637.2	146429.(3287.)
400.	0.18500(0.00579)	0.18303	0.00197	216.6(5.7)	662.7	143541.(3750.)
500.	0.20422(0.00228)	0.20310	0.00112	200.0(6.0)	680.8	136160.(4078.)
600.	0.22167(0.00133)	0.22307	-0.00140	187.1(8.9)	694.1	129866.(6183.)
700.	0.24106(0.00368)	0.24036	0.00070	171.1(9.2)	704.3	120506.(6510.)
800.	0.25451(0.00409)	0.25609	-0.00158	154.3(8.6)	712.3	109908.(6117.)
900.	0.27344(0.00116)	0.27066	0.00278	142.4(10.3)	718.8	102357.(7411.)
1000.	0.28367(0.00337)	0.28331	0.00036	129.1(10.6)	724.2	93494.(7705.)
1250.	0.31268(0.00234)	0.31156	0.00112	103.1(9.6)	734.3	75706.(7076.)

1500.	0.33434(0.00083)	0.33406	0.00028	82.1(9.3)	741.5	60870.(6867.)
1750.	0.35028(0.00111)	0.35085	-0.00057	63.5(9.5)	746.8	47392.(7125.)
2000.	0.36535(0.00391)	0.36414	0.00121	48.9(8.8)	750.9	36689.(6636.)
2250.	0.37329(0.00417)	0.37305	0.00024	35.8(8.5)	754.1	26997.(6435.)
2500.	0.37826(0.00343)	0.37977	-0.00151	24.7(9.0)	756.8	18663.(6826.)
2750.	0.38398(0.00644)	0.38400	-0.00002	15.5(7.7)	759.0	11780.(5822.)
3000.	0.38570(0.00726)	0.38577	-0.00007	8.4(7.0)	760.8	6354.(5310.)
3250.	0.38835(0.00760)	0.38688	0.00147	2.8(5.2)	762.4	2100.(3982.)
3500.	0.38542(0.00538)	0.38610	-0.00068	-0.5(5.7)	763.7	-365.(4361.)
3750.	0.38402(0.00358)	0.38518	-0.00116	-4.8(4.8)	764.9	-3639.(3698.)
4000.	0.38395(0.00564)	0.38364	0.00031	-8.1(3.7)	766.0	-6194.(2799.)
4250.	0.37940(0.00120)	0.38107	-0.00167	-10.8(3.7)	766.9	-8313.(2854.)
4500.	0.38186(0.01251)	0.37818	0.00368	-12.5(3.6)	767.8	-9628.(2763.)
4750.	0.37386(0.00585)	0.37366	0.00020	-14.8(2.9)	768.5	-11374.(2214.)
5000.	0.36918(0.00617)	0.36937	-0.00019	-17.1(1.9)	769.2	-13138.(1443.)
5500.	0.36004(0.00120)	0.35980	0.00024	-18.7(2.1)	770.4	-14422.(1611.)
6000.	0.34815(0.00493)	0.34966	-0.00151	-19.8(2.9)	771.4	-15243.(2220.)
6500.	0.34230(0.00707)	0.34030	0.00200	-19.2(2.1)	772.3	-14820.(1640.)
7000.	0.32948(0.00374)	0.33068	-0.00120	-19.2(1.7)	773.1	-14805.(1342.)
7500.	0.32154(0.00297)	0.32103	0.00051	-19.0(1.0)	773.8	-14687.(804.)
8000.	0.31163(0.00519)	0.31130	0.00033	-18.2(0.8)	774.3	-14061.(586.)
8500.	0.30184(0.00407)	0.30156	0.00028	-17.5(1.1)	774.9	-13530.(890.)
9000.	0.29265(0.00804)	0.29317	-0.00052	-15.9(1.5)	775.3	-12343.(1159.)
9500.	0.28403(0.00433)	0.28540	-0.00137	-15.0(1.8)	775.7	-11636.(1384.)
10000.	0.27902(0.00590)	0.27869	0.00033	-14.0(1.4)	776.1	-10873.(1065.)
10500.	0.27269(0.00957)	0.27234	0.00035	-13.0(0.9)	776.4	-10116.(686.)
11000.	0.26749(0.00549)	0.26596	0.00153	-11.8(0.8)	776.7	-9150.(601.)
11500.	0.26016(0.00258)	0.26094	-0.00078	-12.0(1.1)	777.0	-9293.(847.)
12000.	0.25324(0.00912)	0.25484	-0.00160	-12.1(2.1)	777.3	-9413.(1635.)
12500.	0.24848(0.00954)	0.24892	-0.00044	-12.3(2.3)	777.5	-9540.(1756.)
13000.	0.24695(0.00332)	0.24278	0.00417	-12.5(1.8)	777.7	-9690.(1401.)
13500.	0.23406(0.00828)	0.23627	-0.00221	-11.9(1.2)	777.9	-9249.(968.)
14000.	0.23033(0.01060)	0.22894	0.00139	-9.9(2.6)	778.0	-7713.(2007.)
14500.	0.22317(0.01274)	0.22413	-0.00096	-9.4(2.8)	778.2	-7342.(2167.)
15000.	0.21686(0.00753)	0.21997	-0.00311	-8.9(2.6)	778.3	-6946.(2003.)
15500.	0.21508(0.00906)	0.21698	-0.00190	-7.2(2.4)	778.5	-5614.(1882.)
16000.	0.22170(0.00962)	0.21442	0.00728	-7.7(2.7)	778.6	-5977.(2101.)
16500.	0.20951(0.01426)	0.21052	-0.00101	-6.6(2.2)	778.7	-5165.(1737.)
17000.	0.20477(0.01762)	0.20592	-0.00115	-4.8(2.2)	778.8	-3735.(1732.)
17500.	0.20477(0.00540)	0.20323	0.00154	-4.9(2.4)	778.9	-3831.(1905.)
18000.	0.19399(0.01095)	0.20118	-0.00719	-3.3(4.1)	779.0	-2563.(3194.)
18500.	0.19996(0.02005)	0.19994	0.00002	-1.7(3.6)	779.1	-1293.(2829.)
19000.	0.20727(0.01606)	0.19952	0.00775	0.0(0.4)	779.2	-24.(284.)
19500.	0.19648(0.01431)	0.19991	-0.00343	1.6(0.0)	779.3	1246.(0.)

z micras A	P03exp adim B	P03fit adim C	P03exp-P03fit adim D	dP03fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP03fit/dt sec-1 G
50.	0.06410(0.00225)	0.06319	0.00091	135.9(0.0)	470.1	63887.(0.)
100.	0.06950(0.00568)	0.06984	-0.00034	130.0(9.8)	523.2	68016.(5138.)
150.	0.07573(0.00066)	0.07619	-0.00046	124.1(7.7)	566.9	70352.(4381.)
200.	0.08099(0.00253)	0.08225	-0.00126	118.2(6.1)	599.3	70837.(3663.)
250.	0.08829(0.00074)	0.08801	0.00028	112.2(5.5)	620.3	69598.(3414.)
300.	0.09382(0.00221)	0.09429	-0.00047	109.2(8.2)	637.2	69582.(5203.)
400.	0.10458(0.00186)	0.10351	0.00107	92.2(6.9)	662.7	61121.(4592.)
500.	0.11202(0.00354)	0.11160	0.00042	78.4(7.8)	680.8	53354.(5289.)
600.	0.11985(0.00066)	0.11844	0.00141	65.1(8.5)	694.1	45200.(5868.)
700.	0.12055(0.00248)	0.12421	-0.00366	54.2(11.1)	704.3	38180.(7804.)
800.	0.13028(0.00326)	0.12886	0.00142	43.6(9.5)	712.3	31085.(6753.)
900.	0.13360(0.00331)	0.13212	0.00148	34.9(10.0)	718.8	25057.(7172.)
1000.	0.13598(0.00223)	0.13487	0.00111	26.7(9.9)	724.2	19300.(7145.)
1250.	0.13943(0.00259)	0.13869	0.00074	12.1(8.9)	734.3	8900.(6515.)
1500.	0.13855(0.00254)	0.13870	-0.00015	-0.8(7.2)	741.5	-573.(5340.)
1750.	0.13834(0.00101)	0.13682	0.00152	-7.9(7.7)	746.8	-5915.(5765.)
2000.	0.13215(0.00284)	0.13363	-0.00148	-13.6(8.2)	750.9	-10175.(6158.)
2250.	0.12884(0.00238)	0.12873	0.00011	-17.5(7.0)	754.1	-13182.(5283.)
2500.	0.12358(0.00205)	0.12363	-0.00005	-20.5(4.5)	756.8	-15484.(3369.)
2750.	0.11816(0.00228)	0.11743	0.00073	-21.6(4.2)	759.0	-16402.(3199.)
3000.	0.11098(0.00850)	0.11195	-0.00097	-21.8(4.4)	760.8	-16593.(3348.)
3250.	0.10678(0.00583)	0.10617	0.00061	-22.5(3.1)	762.4	-17154.(2335.)
3500.	0.09876(0.00594)	0.10069	-0.00193	-22.9(2.2)	763.7	-17519.(1716.)
3750.	0.09654(0.00134)	0.09474	0.00180	-22.2(0.7)	764.9	-16965.(513.)
4000.	0.08985(0.00024)	0.08897	0.00088	-20.5(1.5)	766.0	-15695.(1185.)
4250.	0.08361(0.00222)	0.08374	-0.00013	-19.6(2.1)	766.9	-14993.(1579.)
4500.	0.07661(0.00173)	0.07925	-0.00264	-18.0(2.7)	767.8	-13828.(2078.)
4750.	0.07456(0.00167)	0.07493	-0.00037	-17.4(2.3)	768.5	-13333.(1748.)
5000.	0.07260(0.00409)	0.07124	0.00136	-15.2(1.1)	769.2	-11653.(879.)
5500.	0.06452(0.00134)	0.06451	0.00001	-12.8(0.7)	770.4	-9823.(565.)
6000.	0.05838(0.00494)	0.05885	-0.00047	-11.3(0.8)	771.4	-8717.(643.)
6500.	0.05293(0.00262)	0.05327	-0.00034	-10.7(1.4)	772.3	-8248.(1097.)
7000.	0.04826(0.00103)	0.04821	0.00005	-9.9(1.0)	773.1	-7668.(768.)
7500.	0.04448(0.00159)	0.04360	0.00088	-8.7(0.9)	773.8	-6704.(701.)
8000.	0.03945(0.00145)	0.03954	-0.00009	-7.8(1.1)	774.3	-6051.(819.)
8500.	0.03553(0.00315)	0.03543	0.00010	-6.4(0.6)	774.9	-4993.(452.)
9000.	0.03153(0.00407)	0.03291	-0.00138	-6.1(0.5)	775.3	-4736.(356.)

9500.	0.03058(0.00587)	0.03057	0.00001	-6.1(1.2)	775.7	-4695.(909.)
10000.	0.02713(0.00426)	0.02787	-0.00074	-5.5(1.3)	776.1	-4301.(995.)
10500.	0.02938(0.00301)	0.02484	0.00454	-4.8(2.0)	776.4	-3695.(1523.)
11000.	0.02116(0.00814)	0.02247	-0.00131	-4.4(1.3)	776.7	-3421.(973.)
11500.	0.01698(0.00299)	0.01973	-0.00275	-3.9(1.2)	777.0	-3000.(949.)
12000.	0.01727(0.00801)	0.01845	-0.00118	-4.0(1.7)	777.3	-3111.(1332.)
12500.	0.01882(0.00606)	0.01562	0.00320	-2.8(1.5)	777.5	-2159.(1148.)
13000.	0.01534(0.00400)	0.01536	-0.00002	-1.1(1.3)	777.7	-843.(1006.)
13500.	0.01671(0.00343)	0.01525	0.00146	-0.4(1.0)	777.9	-286.(760.)
14000.	0.00906(0.00561)	0.01571	-0.00665	-1.3(2.0)	778.0	-996.(1527.)
14500.	0.01825(0.00943)	0.01517	0.00308	-1.7(2.6)	778.2	-1338.(1988.)
15000.	0.01671(0.00965)	0.01461	0.00210	-1.6(2.3)	778.3	-1216.(1774.)
15500.	0.01650(0.01016)	0.01334	0.00316	-1.5(2.9)	778.5	-1176.(2268.)
16000.	0.00835(0.00779)	0.01345	-0.00510	-2.3(1.8)	778.6	-1797.(1380.)
16500.	0.00937(0.00766)	0.01044	-0.00107	-3.6(0.7)	778.7	-2810.(578.)
17000.	0.00993(0.01477)	0.00840	0.00153	-3.1(1.0)	778.8	-2411.(791.)
17500.	0.01127(0.00867)	0.00608	0.00519	-1.3(2.5)	778.9	-983.(1921.)
18000.	0.00216(0.00883)	0.00589	-0.00373	0.5(4.0)	779.0	379.(3107.)
18500.	0.00432(0.02075)	0.00657	-0.00225	2.2(2.5)	779.1	1741.(1980.)
19000.	0.00525(0.00827)	0.00812	-0.00287	4.0(2.4)	779.2	3104.(1899.)
19500.	0.01382(0.01592)	0.01055	0.00327	5.7(0.0)	779.3	4468.(0.)

z micras A	P04exp adim B	P04fit adim C	P04exp-P04fit adim D	dP04fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP04fit/dt sec-1 G
50.	0.14625(0.00159)	0.14524	0.00101	233.0(0.0)	470.1	109533.(0.)
100.	0.15542(0.00202)	0.15644	-0.00102	215.0(7.2)	523.2	112488.(3750.)
150.	0.16638(0.00388)	0.16674	-0.00036	197.0(6.8)	566.9	111679.(3859.)
200.	0.17552(0.00399)	0.17614	-0.00062	179.0(4.5)	599.3	107275.(2689.)
250.	0.18518(0.00086)	0.18463	0.00055	160.9(9.7)	620.3	99806.(6032.)
300.	0.19293(0.00216)	0.19276	0.00017	145.8(22.4)	637.2	92904.(14292.)
400.	0.20442(0.00063)	0.20440	0.00002	105.8(23.9)	662.7	70114.(15812.)
500.	0.21381(0.00408)	0.21345	0.00036	68.6(25.6)	680.8	46723.(17422.)
600.	0.21874(0.00141)	0.21726	0.00148	36.9(25.5)	694.1	25626.(17727.)
700.	0.21710(0.00423)	0.21769	-0.00059	14.0(27.8)	704.3	9846.(19587.)
800.	0.22025(0.00182)	0.21668	0.00357	-8.0(26.8)	712.3	-5724.(19061.)
900.	0.21041(0.00233)	0.21279	-0.00238	-28.2(26.2)	718.8	-20292.(18825.)
1000.	0.21148(0.00165)	0.20788	0.00360	-43.1(20.2)	724.2	-31235.(14651.)
1250.	0.19676(0.00326)	0.19420	0.00256	-56.7(18.1)	734.3	-41620.(13306.)
1500.	0.17576(0.00111)	0.17719	-0.00143	-63.9(17.8)	741.5	-47360.(13199.)
1750.	0.16132(0.00254)	0.16010	0.00122	-63.5(14.0)	746.8	-47437.(10425.)
2000.	0.14332(0.00393)	0.14298	0.00034	-62.5(10.6)	750.9	-46916.(7982.)
2250.	0.12527(0.00110)	0.12733	-0.00206	-59.3(8.9)	754.1	-44718.(6739.)
2500.	0.11268(0.00465)	0.11305	-0.00037	-53.8(6.0)	756.8	-40701.(4517.)
2750.	0.10100(0.00309)	0.09993	0.00107	-49.3(3.8)	759.0	-37426.(2850.)
3000.	0.08954(0.00668)	0.08872	0.00082	-43.9(1.2)	760.8	-33422.(934.)
3250.	0.07687(0.00340)	0.07874	-0.00187	-39.0(1.0)	762.4	-29734.(737.)
3500.	0.07038(0.00290)	0.06961	0.00077	-35.9(1.7)	763.7	-27394.(1304.)
3750.	0.06110(0.00049)	0.06099	0.00011	-31.9(2.4)	764.9	-24416.(1811.)
4000.	0.05390(0.00255)	0.05371	0.00019	-28.3(2.2)	766.0	-21640.(1718.)
4250.	0.04786(0.00252)	0.04726	0.00060	-24.6(2.1)	766.9	-18835.(1637.)
4500.	0.03978(0.00189)	0.04139	-0.00161	-22.1(2.9)	767.8	-16961.(2197.)
4750.	0.03726(0.00252)	0.03702	0.00024	-18.9(2.3)	768.5	-14517.(1771.)
5000.	0.03193(0.00229)	0.03302	-0.00109	-16.2(1.9)	769.2	-12484.(1473.)
5500.	0.02626(0.00091)	0.02623	0.00003	-12.4(2.2)	770.4	-9561.(1656.)
6000.	0.02225(0.00142)	0.02140	0.00085	-9.5(2.6)	771.4	-7311.(1976.)
6500.	0.01622(0.00164)	0.01703	-0.00081	-7.5(2.1)	772.3	-5788.(1637.)
7000.	0.01401(0.00292)	0.01407	-0.00006	-5.5(1.6)	773.1	-4251.(1215.)
7500.	0.01233(0.00086)	0.01244	-0.00011	-4.8(1.7)	773.8	-3737.(1304.)
8000.	0.00965(0.00349)	0.01039	-0.00074	-3.7(1.3)	774.3	-2896.(1043.)
8500.	0.01049(0.00263)	0.00932	0.00117	-3.1(1.9)	774.9	-2372.(1499.)
9000.	0.00979(0.00099)	0.00784	0.00195	-2.8(1.9)	775.3	-2169.(1510.)
9500.	0.00334(0.00245)	0.00648	-0.00314	-2.7(0.6)	775.7	-2067.(501.)
10000.	0.00644(0.00477)	0.00518	0.00126	-2.5(0.9)	776.1	-1966.(736.)
10500.	0.00340(0.00341)	0.00395	-0.00055	-2.4(0.1)	776.4	-1864.(74.)
11000.	0.00312(0.00657)	0.00278	0.00034	-2.3(0.0)	776.7	-1763.(0.)

z micras A	P05exp adim B	P05fit adim C	P05exp-P05fit adim D	dP05fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP05fit/dt sec-1 G
50.	0.07335(0.00151)	0.07314	0.00021	86.3(0.0)	470.1	40565.(0.)
100.	0.07748(0.00455)	0.07715	0.00033	74.2(11.5)	523.2	38816.(6001.)
150.	0.07946(0.00426)	0.08056	-0.00110	62.1(8.7)	566.9	35204.(4908.)
200.	0.08342(0.00594)	0.08336	0.00006	50.0(6.5)	599.3	29971.(3889.)
250.	0.08595(0.00154)	0.08556	0.00039	37.9(5.8)	620.3	23522.(3599.)
300.	0.08736(0.00104)	0.08595	0.00141	25.4(11.1)	637.2	16166.(7054.)
400.	0.08834(0.00156)	0.08841	-0.00007	10.0(16.0)	662.7	6611.(10623.)
500.	0.08761(0.00117)	0.08823	-0.00062	-7.9(16.4)	680.8	-5392.(11158.)
600.	0.08393(0.00121)	0.08653	-0.00260	-22.8(15.8)	694.1	-15839.(10967.)
700.	0.08835(0.01852)	0.08227	0.00608	-31.0(14.5)	704.3	-21861.(10219.)
800.	0.07712(0.00687)	0.07754	-0.00042	-38.1(10.9)	712.3	-27174.(7728.)
900.	0.07313(0.00346)	0.07256	0.00057	-44.1(12.1)	718.8	-31706.(8690.)
1000.	0.06632(0.00099)	0.06757	-0.00125	-47.9(10.9)	724.2	-34675.(7916.)
1250.	0.05554(0.00148)	0.05538	0.00016	-46.5(9.2)	734.3	-34182.(6783.)

1500.	0.04563(0.00075)	0.04550	0.00013	-38.3(6.9)	741.5	-28392.(5111.)
1750.	0.03657(0.00154)	0.03630	0.00027	-32.8(3.9)	746.8	-24480.(2928.)
2000.	0.02866(0.00172)	0.02897	-0.00031	-27.0(2.4)	750.9	-20244.(1786.)
2250.	0.02314(0.00171)	0.02313	0.00001	-22.7(2.9)	754.1	-17111.(2210.)
2500.	0.01701(0.00104)	0.01829	-0.00128	-18.3(2.6)	756.8	-13887.(1977.)
2750.	0.01565(0.00384)	0.01455	0.00110	-14.3(2.3)	759.0	-10869.(1717.)
3000.	0.01283(0.00165)	0.01177	0.00106	-11.0(2.4)	760.8	-8392.(1798.)
3250.	0.00842(0.00240)	0.00956	-0.00114	-8.5(2.0)	762.4	-6445.(1542.)
3500.	0.00773(0.00482)	0.00809	-0.00036	-6.5(2.3)	763.7	-4989.(1720.)
3750.	0.00696(0.00127)	0.00668	0.00028	-5.8(2.7)	764.9	-4465.(2064.)
4000.	0.00587(0.00116)	0.00537	0.00050	-4.6(2.2)	766.0	-3540.(1707.)
4250.	0.00542(0.00273)	0.00437	0.00105	-3.4(2.0)	766.9	-2611.(1529.)
4500.	0.00403(0.00088)	0.00367	0.00036	-2.2(0.8)	767.8	-1681.(602.)
4750.	0.00233(0.00048)	0.00328	-0.00095	-1.0(0.0)	768.5	-748.(0.)
z micras A	P06exp adim B	P06fit adim C	P06exp-P06fit adim D	dP06fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP06fit/dt sec-1 G
50.	0.13768(0.00116)	0.13829	-0.00061	91.6(0.0)	470.1	43071.(0.)
100.	0.14266(0.00452)	0.14227	0.00039	67.4(15.4)	523.2	35279.(8036.)
150.	0.14496(0.00295)	0.14504	-0.00008	43.3(23.9)	566.9	24518.(13560.)
200.	0.14470(0.00378)	0.14660	-0.00190	19.1(33.8)	599.3	11423.(20268.)
250.	0.14940(0.00108)	0.14694	0.00246	-5.1(43.2)	620.3	-3178.(26809.)
300.	0.14860(0.00146)	0.14465	0.00395	-32.0(44.1)	637.2	-20390.(28088.)
400.	0.13813(0.00054)	0.13852	-0.00039	-67.5(30.8)	662.7	-44706.(20444.)
500.	0.12897(0.00363)	0.12883	0.00014	-91.3(20.1)	680.8	-62143.(13650.)
600.	0.11693(0.00181)	0.11724	-0.00031	-105.0(27.4)	694.1	-72881.(18984.)
700.	0.10706(0.00263)	0.10526	0.00180	-106.2(25.5)	704.3	-74797.(17931.)
800.	0.09301(0.00165)	0.09393	-0.00092	-103.8(24.0)	712.3	-73937.(17095.)
900.	0.08325(0.00296)	0.08335	-0.00010	-100.7(17.5)	718.8	-72383.(12586.)
1000.	0.07373(0.00056)	0.07379	-0.00006	-93.7(12.0)	724.2	-67865.(8712.)
1250.	0.05215(0.00119)	0.05305	-0.00090	-75.0(10.2)	734.3	-55109.(7505.)
1500.	0.03700(0.00127)	0.03751	-0.00051	-56.9(4.8)	741.5	-42191.(3589.)
1750.	0.02555(0.00088)	0.02634	-0.00079	-43.4(4.0)	746.8	-32396.(2951.)
2000.	0.01760(0.00214)	0.01797	-0.00037	-32.0(7.2)	750.9	-24006.(5376.)
2250.	0.01349(0.00177)	0.01272	0.00077	-22.4(9.9)	754.1	-16914.(7487.)
2500.	0.01049(0.00283)	0.00805	0.00244	-14.9(10.1)	756.8	-11299.(7621.)
2750.	0.00550(0.00168)	0.00525	0.00025	-7.4(7.4)	759.0	-5650.(5646.)
3000.	0.00511(0.00115)	0.00433	0.00078	0.0(5.0)	760.8	35.(3834.)
3250.	0.00378(0.00268)	0.00528	-0.00150	7.5(0.0)	762.4	5746.(0.)
z micras A	P07exp adim B	P07fit adim C	P07exp-P07fit adim D	dP07fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP07fit/dt sec-1 G
50.	0.05911(0.00158)	0.05924	-0.00013	2.3(0.0)	470.1	1091.(0.)
100.	0.05853(0.00126)	0.05914	-0.00061	-6.2(5.0)	523.2	-3220.(2599.)
150.	0.06011(0.00293)	0.05862	0.00149	-14.6(13.1)	566.9	-8294.(7415.)
200.	0.05513(0.00319)	0.05768	-0.00255	-23.1(16.1)	599.3	-13844.(9643.)
250.	0.05798(0.00149)	0.05631	0.00167	-31.6(23.8)	620.3	-19589.(14763.)
300.	0.05644(0.00164)	0.05405	0.00239	-40.8(20.6)	637.2	-25972.(13145.)
400.	0.04800(0.00039)	0.04843	-0.00043	-54.0(10.6)	662.7	-35812.(7031.)
500.	0.04219(0.00200)	0.04205	0.00014	-57.2(8.4)	680.8	-38915.(5715.)
600.	0.03571(0.00206)	0.03518	0.00053	-58.4(13.2)	694.1	-40515.(9176.)
700.	0.02881(0.00142)	0.02944	-0.00063	-53.3(14.7)	704.3	-37560.(10353.)
800.	0.02376(0.00166)	0.02471	-0.00095	-46.7(11.9)	712.3	-33264.(8498.)
900.	0.02024(0.00161)	0.02083	-0.00059	-40.8(7.8)	718.8	-29298.(5635.)
1000.	0.01723(0.00055)	0.01744	-0.00021	-33.9(1.2)	724.2	-24565.(885.)
1250.	0.01053(0.00094)	0.01014	0.00039	-24.5(4.8)	734.3	-17968.(3530.)
1500.	0.00636(0.00062)	0.00521	0.00115	-15.0(5.3)	741.5	-11145.(3908.)
1750.	0.00262(0.00169)	0.00263	-0.00001	-5.6(3.0)	746.8	-4164.(2222.)
2000.	0.00195(0.00159)	0.00242	-0.00047	3.9(0.0)	750.9	2908.(0.)
z micras A	P08exp adim B	P08fit adim C	P08exp-P08fit adim D	dP08fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP08fit/dt sec-1 G
50.	0.10008(0.00442)	0.10220	-0.00212	-79.9(0.0)	470.1	-37556.(0.)
100.	0.09941(0.00046)	0.09805	0.00136	-86.3(16.0)	523.2	-45168.(8356.)
150.	0.09420(0.00200)	0.09357	0.00063	-92.8(22.9)	566.9	-52591.(12993.)
200.	0.08807(0.00571)	0.08877	-0.00070	-99.2(27.0)	599.3	-59451.(16187.)
250.	0.08618(0.00180)	0.08365	0.00253	-105.6(28.0)	620.3	-65504.(17356.)
300.	0.07921(0.00393)	0.07700	0.00221	-118.3(20.4)	637.2	-75381.(13005.)
400.	0.06408(0.00298)	0.06415	-0.00007	-119.1(8.3)	662.7	-78928.(5523.)
500.	0.05068(0.00119)	0.05170	-0.00102	-112.0(12.2)	680.8	-76250.(8319.)
600.	0.04088(0.00175)	0.04054	0.00034	-100.7(19.9)	694.1	-69896.(13840.)
700.	0.03117(0.00178)	0.03179	-0.00062	-85.6(13.7)	704.3	-60316.(9663.)
800.	0.02409(0.00162)	0.02482	-0.00073	-70.5(7.7)	712.3	-50231.(5485.)
900.	0.01872(0.00061)	0.01947	-0.00075	-56.3(3.7)	718.8	-40468.(2665.)
1000.	0.01376(0.00013)	0.01429	-0.00053	-47.4(8.2)	724.2	-34320.(5938.)
1250.	0.00685(0.00060)	0.00522	0.00163	-25.1(11.3)	734.3	-18438.(8312.)
1500.	0.00366(0.00164)	0.00173	0.00193	-2.8(7.9)	741.5	-2102.(5894.)
1750.	0.00227(0.00022)	0.00381	-0.00154	19.4(0.0)	746.8	14518.(0.)
z	P09exp	P09fit	P09exp-P09fit	dP09fit/dz	v	dP09fit/dt

micras A	adim B	adim C	adim D	metros-1 E	m/s F	sec-1 G
50.	0.05218 (0.00239)	0.05359	-0.00141	-114.2 (0.0)	470.1	-53685. (0.)
100.	0.04859 (0.00203)	0.04805	0.00054	-107.7 (5.1)	523.2	-56349. (2685.)
150.	0.04463 (0.00351)	0.04282	0.00181	-101.3 (4.8)	566.9	-57427. (2730.)
200.	0.03882 (0.00653)	0.03792	0.00090	-94.8 (4.5)	599.3	-56838. (2670.)
250.	0.03211 (0.00092)	0.03334	-0.00123	-88.4 (5.2)	620.3	-54828. (3247.)
300.	0.02852 (0.00157)	0.02884	-0.00032	-85.6 (5.6)	637.2	-54557. (3566.)
400.	0.02111 (0.00094)	0.02111	0.00000	-70.7 (3.5)	662.7	-46833. (2337.)
500.	0.01546 (0.00139)	0.01532	0.00014	-54.8 (1.4)	680.8	-37287. (931.)
600.	0.01048 (0.00168)	0.01083	-0.00035	-41.4 (2.5)	694.1	-28757. (1734.)
700.	0.00736 (0.00396)	0.00724	0.00012	-30.3 (4.7)	704.3	-21368. (3331.)
800.	0.00531 (0.00117)	0.00476	0.00055	-19.3 (6.5)	712.3	-13712. (4615.)
900.	0.00328 (0.00136)	0.00339	-0.00011	-8.2 (2.8)	718.8	-5868. (2028.)
1000.	0.00297 (0.00050)	0.00313	-0.00016	2.9 (0.0)	724.2	2118. (0.)
z micras A	P10exp adim B	P10fit adim C	P10exp-P10fit adim D	dP10fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP10fit/dt sec-1 G
50.	0.08232 (0.00244)	0.08421	-0.00189	-232.2 (0.0)	470.1	-109157. (0.)
100.	0.07447 (0.00083)	0.07302	0.00145	-215.2 (5.5)	523.2	-112593. (2870.)
150.	0.06262 (0.00357)	0.06269	-0.00007	-198.3 (5.5)	566.9	-112416. (3119.)
200.	0.05628 (0.00349)	0.05319	0.00309	-181.4 (5.2)	599.3	-108713. (3097.)
250.	0.04324 (0.00137)	0.04455	-0.00131	-164.4 (3.9)	620.3	-101977. (2412.)
300.	0.03569 (0.00090)	0.03656	-0.00087	-152.3 (3.6)	637.2	-97046. (2282.)
400.	0.02346 (0.00183)	0.02382	-0.00036	-116.2 (1.3)	662.7	-77006. (848.)
500.	0.01331 (0.00129)	0.01421	-0.00090	-86.0 (3.8)	680.8	-58515. (2573.)
600.	0.00845 (0.00106)	0.00709	0.00136	-56.4 (7.5)	694.1	-39119. (5178.)
700.	0.00468 (0.00146)	0.00294	0.00174	-26.8 (11.1)	704.3	-18854. (7846.)
800.	0.00182 (0.00055)	0.00174	0.00008	2.8 (4.9)	712.3	2009. (3477.)
900.	0.00238 (0.00097)	0.00350	-0.00112	32.4 (0.0)	718.8	23296. (0.)
z micras A	P11exp adim B	P11fit adim C	P11exp-P11fit adim D	dP11fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP11fit/dt sec-1 G
50.	0.02941 (0.00277)	0.03082	-0.00141	-99.4 (0.0)	470.1	-46742. (0.)
100.	0.02626 (0.00168)	0.02606	0.00020	-90.8 (0.0)	523.2	-47527. (0.)
150.	0.02327 (0.00070)	0.02173	0.00154	-82.3 (0.0)	566.9	-46628. (0.)
200.	0.01970 (0.00291)	0.01784	0.00186	-73.7 (0.0)	599.3	-44144. (0.)
250.	0.01391 (0.00060)	0.01437	-0.00046	-65.1 (0.0)	620.3	-40363. (0.)
300.	0.00964 (0.00201)	0.01133	-0.00169	-56.5 (0.0)	637.2	-35989. (0.)
400.	0.00581 (0.00135)	0.00654	-0.00073	-39.3 (0.0)	662.7	-26037. (0.)
500.	0.00402 (0.00130)	0.00347	0.00055	-22.1 (0.0)	680.8	-15052. (0.)
600.	0.00227 (0.00168)	0.00212	0.00015	-4.9 (0.0)	694.1	-3423. (0.)
z micras A	P12exp adim B	P12fit adim C	P12exp-P12fit adim D	dP12fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP12fit/dt sec-1 G
50.	0.04398 (0.00337)	0.04417	-0.00019	-175.0 (0.0)	470.1	-82268. (0.)
100.	0.03492 (0.00126)	0.03588	-0.00096	-156.4 (2.4)	523.2	-81828. (1260.)
150.	0.03108 (0.00433)	0.02853	0.00255	-137.8 (1.7)	566.9	-78119. (946.)
200.	0.02127 (0.00422)	0.02210	-0.00083	-119.3 (0.9)	599.3	-71496. (556.)
250.	0.01582 (0.00036)	0.01648	-0.00066	-101.1 (0.2)	620.3	-62712. (116.)
300.	0.01199 (0.00051)	0.01193	0.00006	-81.0 (0.6)	637.2	-51613. (352.)
400.	0.00592 (0.00172)	0.00584	0.00008	-40.9 (2.0)	662.7	-27104. (1348.)
500.	0.00380 (0.00090)	0.00375	0.00005	-0.8 (0.0)	680.8	-545. (0.)
z micras A	P13exp adim B	P13fit adim C	P13exp-P13fit adim D	dP13fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP13fit/dt sec-1 G
50.	0.01435 (0.00078)	0.01437	-0.00002	-72.7 (0.0)	470.1	-34181. (0.)
100.	0.01142 (0.00186)	0.01108	0.00034	-58.8 (6.9)	523.2	-30775. (3600.)
150.	0.00757 (0.00316)	0.00848	-0.00091	-44.9 (1.4)	566.9	-25471. (811.)
200.	0.00746 (0.00262)	0.00674	0.00072	-39.1 (4.0)	599.3	-23421. (2408.)
250.	0.00510 (0.00014)	0.00486	0.00024	-36.1 (9.5)	620.3	-22380. (5873.)
300.	0.00289 (0.00084)	0.00313	-0.00024	-33.1 (0.0)	637.2	-21085. (0.)
z micras A	P14exp adim B	P14fit adim C	P14exp-P14fit adim D	dP14fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP14fit/dt sec-1 G
50.	0.01978 (0.00123)	0.02037	-0.00059	-120.6 (0.0)	470.1	-56694. (0.)
100.	0.01608 (0.00240)	0.01485	0.00123	-100.3 (9.9)	523.2	-52477. (5196.)
150.	0.01020 (0.00191)	0.01035	-0.00015	-80.0 (6.8)	566.9	-45352. (3877.)
200.	0.00582 (0.00334)	0.00646	-0.00064	-67.2 (3.7)	599.3	-40279. (2246.)
250.	0.00492 (0.00059)	0.00377	0.00115	-40.8 (0.7)	620.3	-25277. (408.)
300.	0.00192 (0.00064)	0.00239	-0.00047	-14.3 (0.0)	637.2	-9106. (0.)
z micras A	P15exp adim B	P15fit adim C	P15exp-P15fit adim D	dP15fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP15fit/dt sec-1 G

50.	0.00666(0.00165)	0.00666	0.00000	-4.4(0.0)	470.1	-2085.(0.)
100.	0.00526(0.00290)	0.00526	0.00000	-51.9(0.0)	523.2	-27154.(0.)
150.	0.00147(0.00228)	0.00147	0.00000	-99.4(0.0)	566.9	-56327.(0.)
z micras A	Pl6exp adim B	Pl6fit adim C	Pl6exp-Pl6fit adim D	dPl6fit/dz metros-1 E	v m/s F	dPl6fit/dt sec-1 G
50.	0.00844(0.00107)	0.00844	0.00000	-123.6(0.0)	470.1	-58104.(0.)
100.	0.00420(0.00119)	0.00420	0.00000	-45.6(0.0)	523.2	-23868.(0.)
150.	0.00387(0.00069)	0.00387	0.00000	32.4(0.0)	566.9	18339.(0.)

A: Posición de la tobera. z=0 no corresponde con el punto donde M=1.

B: Población obtenida a partir de las intensidades medidas en el laboratorio.

C: Ajuste puntual de la población.

D: Diferencia entre la población experimental y la ajustada.

E: Derivada en z de la población ajustada con su error.

F: Velocidad de expansión.

G: Derivada temporal de la población ($dP/dt=v*dP/dz$).

z micras H	nexp 10 ²² m-3 I	nfit 10 ²² m-3 J	nexp-nfit 10 ²² m-3 K	Ttpoint Kelvin L	Ttsmo Kelvin M	Trpoint Kelvin N	Trfit Kelvin O
50.	1314.6300	1569.9105	-255.2805	198.170	236.610(7.1)	146.800	134.380(2.4)
100.	969.4739	1157.5950	-188.1211	169.280	202.850(6.1)	137.130	124.820(2.5)
150.	751.1007	1201.4720	-450.3713	152.410	218.190(7.5)	124.360	116.130(1.9)
200.	558.8229	546.8311	11.9918	136.940	135.320(9.1)	108.640	108.220(2.2)
250.	426.2556	413.2610	12.9946	115.810	117.550(1.7)	106.550	101.020(0.7)
300.	331.1685	321.1103	10.0582	103.230	103.900(2.8)	98.360	94.460(0.5)
400.	213.9823	207.3731	6.6092	87.020	84.600(3.8)	82.120	83.020(0.4)
500.	150.0913	143.5423	6.5490	74.810	71.800(2.3)	72.260	73.500(0.2)
600.	109.0091	104.6425	4.3666	65.440	62.760(2.3)	64.140	65.560(0.3)
700.	81.8094	79.3781	2.4313	58.040	56.050(2.1)	57.650	58.920(0.7)
800.	63.4835	62.1264	1.3571	52.440	50.860(2.0)	52.080	53.350(0.3)
900.	52.9139	49.8626	3.0513	48.920	46.700(1.4)	48.180	48.670(0.2)
1000.	42.9884	40.8534	2.1350	44.920	43.270(1.2)	44.480	44.710(0.1)
1250.	27.7387	26.6092	1.1295	37.560	36.740(0.5)	37.540	37.230(0.1)
1500.	19.0490	18.6447	0.4043	31.990	31.980(0.6)	32.810	32.120(0.1)
1750.	13.8693	13.7614	0.1079	28.100	28.280(1.0)	29.010	28.500(0.7)
2000.	10.5959	10.5594	0.0365	25.530	25.310(0.5)	25.590	25.840(0.1)
2250.	8.4136	8.3500	0.0636	22.850	22.870(0.7)	24.000	23.780(0.1)
2500.	6.8098	6.7631	0.0467	20.830	20.840(0.9)	22.310	22.140(0.3)
2750.	5.7318	5.5860	0.1458	19.870	19.150(0.6)	20.170	20.770(0.3)
3000.	4.6012	4.6893	-0.0881	17.520	17.710(0.4)	19.550	19.600(0.0)
3250.	3.8913	3.9908	-0.0995	16.430	16.490(0.3)	18.200	18.570(0.2)
3500.	3.3260	3.4364	-0.1104	15.360	15.430(0.4)	17.210	17.660(0.1)
3750.	2.8790	2.9892	-0.1102	14.270	14.510(0.3)	16.640	16.840(0.1)
4000.	2.5767	2.6232	-0.0465	13.630	13.710(0.3)	15.960	16.090(0.1)
4250.	2.2612	2.3201	-0.0589	12.710	13.010(0.4)	15.540	15.410(0.2)
4500.	2.0114	2.0663	-0.0549	12.240	12.380(0.4)	14.630	14.780(0.2)
4750.	1.8010	1.8516	-0.0506	12.010	11.810(0.3)	13.490	14.210(0.1)
5000.	1.6170	1.6684	-0.0514	11.280	11.300(0.4)	13.290	13.680(0.1)
5500.	1.3804	1.3746	0.0058	10.550	10.420(0.2)	12.540	12.730(0.0)
6000.	1.2118	1.1516	0.0602	9.980	9.670(1.0)	11.970	11.930(0.0)
6500.	0.9648	0.9784	-0.0136	8.990	9.020(0.2)	11.160	11.240(0.1)
7000.	0.7879	0.8412	-0.0533	8.040	8.460(0.4)	10.760	10.660(0.1)
7500.	0.7914	0.7308	0.0606	8.230	7.950(0.7)	10.440	10.160(0.0)
8000.	0.6263	0.6406	-0.0143	7.280	7.490(0.2)	9.930	9.730(0.0)
8500.	0.5581	0.5660	-0.0079	6.720	7.080(0.2)	9.970	9.360(0.1)
9000.	0.5133	0.5036	0.0097	6.440	6.700(0.4)	9.770	9.050(0.2)
9500.	0.4406	0.4510	-0.0104	6.470	6.350(0.4)	8.340	8.780(0.3)
10000.	0.4345	0.4061	0.0284	6.060	6.030(0.2)	9.070	8.550(0.1)
10500.	0.3673	0.3675	-0.0002	5.740	5.730(0.5)	8.330	8.360(0.2)
11000.	0.3469	0.3341	0.0128	5.630	5.450(0.2)	8.100	8.190(0.1)
11500.	0.3125	0.3051	0.0074	5.410	5.190(0.3)	7.740	8.050(0.2)
12000.	0.2688	0.2796	-0.0108	4.890	4.940(0.2)	7.740	7.930(0.2)
12500.	0.2641	0.2572	0.0069	4.780	4.720(0.2)	7.880	7.820(0.1)
13000.	0.2244	0.2373	-0.0129	4.420	4.510(0.2)	7.510	7.730(0.2)
13500.	0.2429	0.2197	0.0232	4.620	4.310(0.3)	7.610	7.660(0.0)
14000.	0.2067	0.2039	0.0028	4.530	4.120(0.3)	6.680	7.590(0.3)
14500.	0.1964	0.1898	0.0066	3.970	3.950(0.3)	7.720	7.530(0.1)
15000.	0.1781	0.1770	0.0011	3.780	3.790(0.4)	7.540	7.490(0.1)
15500.	0.1511	0.1655	-0.0144	3.400	3.630(0.5)	7.520	7.450(0.1)
16000.	0.1597	0.1551	0.0046	3.860	3.490(0.3)	6.550	7.410(0.3)
16500.	0.1518	0.1456	0.0062	3.690	3.350(0.5)	6.660	7.380(0.2)
17000.	0.1465	0.1369	0.0096	3.590	3.230(0.4)	6.720	7.360(0.1)
17500.	0.1125	0.1290	-0.0165	2.960	3.110(0.3)	6.900	7.330(0.1)
18000.	0.1095	0.1218	-0.0123	3.530	3.000(0.5)	5.150	7.320(0.5)
18500.	0.1182	0.1151	0.0031	3.440	2.890(0.1)	5.760	7.300(0.4)

H: Posición de la tobera. z=0 no corresponde con el punto donde M=1.

I: Densidad obtenida a partir de las intensidades de la banda Q ro-vibracional del n2.

J: Ajuste de la densidad experimental.

K: Diferencia entre la densidad experimental y la ajustada.

L: Temperatura traslacional calculada a partir de los puntos experimentales de densidad y temperatura rotacional.
M: Temperatura traslacional calculada a partir de los ajustes de los puntos experimentales de densidad y temperatura rotacional.
N: Temperatura rotacional experimental.
O: Ajuste de la temperatura rotacional.

* CUADERNO DE LABORATORIO *

POBLACIONES

Preparación del experimento
.....

- 1) Pongo el cero del baratrón y el sensotec.
- 2) Enfoco la óptica a 60 cm-1 en estático con una presión de cámara de unos 50 mbar de N₂.
- 3) Utilizo la Rayleigh para colocar la lámina de semionda. No toco el enfoque del sistema de colección. Lo más adecuado es utilizar la banda Q de la transición vibracional 2-1, pero los resultados con la Rayleigh son también buenos. La posición óptima es 132.2°
- 4) Centro la tobera en el eje de expansión con una rendija del monocromador de 50umx1mm y con un agrupamiento de 1x74. La tobera se ha ido +2.32 um desde el experimento anterior.
- 5) Coloco la pantalla en las condiciones anteriores.
- 6) Centro la tobera en el eje de colección utilizando la línea J=0 de rotación con la tobera a 50um.
Parece que al mover la tobera +7.94 um, mejora algo la señal.
Utilizar las líneas de rotación no es lo mejor porque la temperatura rotacional de la zona del jet que estamos observando puede afectar a la intensidad de J=0 y confundirnos pero teniendo en cuenta que sólo vamos a moverla menos de 10um, el efecto (aunque sea malo) no va a ser excesivamente importante.

7) Medidas:

Condiciones experimentales:
- P(atmosférica, Rocasolano)=945.75(0.05) mbar
- P0(precámara, Sensotec)=1054(4) mbar
- T(ambiente)=24.0(0.5) °C=297.0(0.5) K
- P(cámara, Baratrón 1 bar)=0.150(0.005) mbar
- Potencia del láser (2045)=5.8 W@514.5 nm
- S2=7 mmx15 mm

z (um)	Archivos	Comentarios
50	00-02 00poblaciones.crg	Con pantalla, 50umx1mm, 5x20, T=10s, 2 fotos
100	03-05	
150	06-08	
200	09-12	
250	00-02 01poblaciones.crg	Sin pantalla, 50umx1mm, 5x60, T=10s, 2 fotos
300	03-05	
400	00-02 02poblaciones.crg	Sin pantalla, 50umx1mm, 5x74, T=10s, 2 fotos
500	03-06	
600	00-02 03poblaciones.crg	Sin pantalla, 50umx2mm, 5x100, T=10s, 2 fotos
700	03-06	
800	00-02 04poblaciones.crg	Sin pantalla, 50umx2mm, 5x148, T=10s, 2 fotos
900	03-06	
1000	00-02 05poblaciones.crg	Sin pantalla, 100umx5mm, 5x200, T=10s, 2 foto
1250	03-05	
1500	00-02 06poblaciones.crg	Sin pantalla, 150umx5mm, 5x300, T=10s, 1 fotos
1750	03-05	
2000	06-09	
2250	00-03 07poblaciones.crg	Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=10s, 1 foto
2500	04-06	
2750	07-09	
3000	10-13	
3250	14-18	
3500	19-24	
3750	00-02 08poblaciones.crg	Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=30s, 1 foto
4000	03-05	
4250	06-08	
4500	09-12	
4750	13-17	
5000	18-23	
5500	00-03 09poblaciones.crg	Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=60s, 1 foto
6000	04-06	
6500	07-09	
7000	10-12	
7500	13-16	
8000	17-20	
8500	21-25	
9000	26-29	

```

9500    30-33
10000   34-38
10500   39-42
11000   43-47
11500   48-52
12000   53-56
12500   57-60
13000   61-65
13500   66-70
14000   71-75
14500   00-05 10poblaciones.crg Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=60s, 1 foto
15000   06-10
15500   11-15
16000   16-21
16500   22-26
17000   27-31
17500   32-37
18000   38-43
18500   44-49
19000   50-55
19500   56-62

```

Última posición de la tobera: -19500.11 um.

DENSIDADES ABSOLUTAS

Consideraciones iniciales

Debido a que la señal nos permite llegar relativamente bien hasta 11mm, mediremos para 300, 900, 3000, 6000, 9000, 12000, 15000 y 18000 um sin utilizar la pantalla en ningún caso.

Preparación del experimento

- 1) Pongo el cero del baratrón y el sensotec.
- 2) Enfoco la óptica a 2330 cm-1 en estático con una presión de cámara de unos 50 mbar de N2.
- 3) Utilizo la banda Q rovibracional para colocar el eje de la lámina de semionda. La posición óptima es 87.6°.
- 4) Centro la tobera en el eje de expansión con una rendija del monocromador de 50umx1mm. La tobera se ha ido +1.92 um desde el experimento anterior.
- 5) Coloco la pantalla sólo para 300 um.
- 6) Considero que la tobera no se ha movido en el eje de colección. Aunque lo haya hecho, es una cantidad pequeña teniendo en cuenta que la distancia mínima que vamos a considerar es 300 um.
- 7) Medidas:

Condiciones experimentales:

- P(atmosférica, Rocasolano) [14/12/05]=943.40(0.20) mbar
[15/12/05]=942.65(0.05) mbar
- T(ambiente) [05/12/05]=23.5(0.5)°C=296.5(0.5) K
[07/12/05]=24.0(0.5)°C=297.0(0.5) K
- Potencia del láser (2045)=5.8W@514.5nm
- S2=7mmx15mm

Comentarios: Las presiones en precámara que se dan a continuación son presiones medidas con el Sensotec. En estos casos no es necesario dar una presión inicial y otra final porque el flujo de gas es bastante estable. Las presiones de cámara están medidas con el baratrón de 1bar.

[14/12/05]

z=300um

,,,,,,

S=50umx1mm, Agrup.=5x40, T=10s, Con pantalla
Archivos=0#expansion300.crg, 0#estatico300.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	1056.0(0.5)	00-04	160.95(0.05)	00-04
2	1056.0(1.0)	00-04	169.30(0.10)	00-04
3	1053.5(0.5)	00-04	174.95(0.05)	00-04

z=900um

,,,,,,

S=100umx5mm, Agrup.=5x370, T=10s, Sin pantalla
Archivos=0#expansion900.crg, 0#estatico900.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	1056.0(0.5)	00-04	160.95(0.05)	00-04
2	1056.0(1.0)	00-04	169.30(0.10)	00-04
3	1053.5(0.5)	00-04	174.95(0.05)	00-04

```

1      1055.5 (0.5)      00-04      53.11 (0.01)      00-04
2      1056.5 (0.5)      00-04      53.24 (0.01)      00-04
3      1057.5 (0.5)      00-04      53.98 (0.01)      00-04

```

z=3000um

////////

S=150umx5mm, Agrup.=5x370, T=30s
Archivos=0#expansion3000.crg, 0#estatico3000.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	1054.5 (0.5)	00-04	6.54 (0.01)	00-04
2	1058.0 (0.5)	00-04	6.50 (0.01)	00-04
3	1055.0 (1.0)	00-04	6.72 (0.01)	00-04

z=6000um

////////

S=150umx5mm, Agrup.=5x370, T=60s
Archivos=0#expansion6000.crg, 0#estatico6000.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	1055.5 (2.5)	00-04	2.60 (0.01)	00-04
2	1055.0 (---) *	00-04	2.58 (0.01)	00-04
3	1056.0 (---) *	00-04	2.56 (0.01)	00-04

z=9000um

////////

S=150umx5mm, Agrup.=5x370, T=60s
Archivos=0#expansion9000.crg, 0#estatico9000.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	1054.5 (1.5)	00-04	0.62 (0.01)	00-04
2	1054.5 (1.5)	00-04	0.61 (0.01)	00-04
3	1054.5 (1.5)	00-04	0.60 (0.01)	00-04

Última posición de la tobera: -9000.05 um

[15/12/05]

z=12000um

////////

S=150umx5mm, Agrup.=5x370, T=60s
Archivos=0#expansion12000.crg, 0#estatico12000.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	1058.0 (1.0)	00-04	0.56 (0.01)	00-04
2	1060.0 (---) *	00-04	0.49 (0.01)	00-04
3	1059.5 (0.5)	00-04	0.47 (0.01)	00-04

z=15000um

////////

S=150umx5mm, Agrup.=5x370, T=60s
Archivos=0#expansion15000.crg, 0#estatico15000.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	1059.0 (---) *	00-04	0.55 (0.01)	00-04
2	1059.0 (---) *	00-04	0.54 (0.01)	00-04
3	1059.0 (---) *	00-04	0.56 (0.01)	00-04

z=18000um

////////

S=150umx5mm, Agrup.=5x370, T=60s
Archivos=0#expansion18000.crg, 0#estatico18000.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	1058.5 (1.5)	00-04	0.36 (0.01)	00-04
2	1058.0 (1.0)	00-04	0.37 (0.01)	00-04
3	1057.5 (1.5)	00-04	0.39 (0.01)	00-04

Última posición de la tobera: -18000 um

(*) No tomé la presión final por lo que no puedo dar el error aunque la precisión del sensotec nos permite dar un error mínimo de 0.5 mbar.

DENSIDADES RELATIVAS

Consideraciones iniciales

Las posiciones de tobera en las que mediremos serán las mismas que para las poblaciones excepto en el punto 250um, que no aparece en esta serie.

Preparación del experimento

- 1) Pongo el cero del baratrón (se ha ido unos 0.02 mbar).
- 2) Enfoco la óptica a 2330 cm⁻¹ en estático con una presión de cámara de unos 50 mbar de N₂ con una rendija de 150umx10mm y un agrupamiento de 3x400.
- 3) Utilizo la banda Q rovibracional para colocar el eje de la lámina de semionda. La posición que maximiza la señal es 87.9°.
- 4) Centro la tobera en el eje de expansión con una rendija del monocromador de 50umx1mm y agrupamiento de 3x77. La tobera se ha ido +6.07 um desde el experimento anterior.
- 5) Coloco la pantalla.
- 6) Centro la tobera en el eje de colección a 2330 cm⁻¹ utilizando una rendija para el monocromador de 150umx10mm, con la pantalla con la cámara a una presión de 50.3 mbar.
- 7) Medidas:

Condiciones experimentales:

- P0 (precámara, Sensotec, inicial)=51.00(0.05) mbar
- T(ambiente)=23.5(0.5)°C=296.5(0.5) K
- P(cámara, Baratrón 1 bar)=0.090(0.005) mbar
- Potencia del láser (2045)=5.8 W@514.5 nm
- S2=7 mmx15 mm

z (um)	Archivos	Comentarios
[14/12/05]		
50	00-04 00densidad.crg	Con pantalla, 50umx1mm, 5x20, T=10s, 2 fotos
100	05-09	
150	10-14	
200	15-19	
200	00-03 01densidad.crg	Sin pantalla, 50umx1mm, 5x60, T=10s, 2 fotos
250	04-07	
300	08-12	
400	13-17	
400	00-03 02densidad.crg	Sin pantalla, 50umx1mm, 5x74, T=10s, 2 fotos
500	04-07	
600	08-13	
600	00-03 03densidad.crg	
700	04-07	Sin pantalla, 50umx2mm, 5x100, T=10s, 2 fotos
800	08-13	
800	00-03 04densidad.crg	
900	04-07	
1000	08-12	Sin pantalla, 100umx5mm, 5x200, T=10s, 2 foto
1000	00-03 05densidad.crg	
1250	04-07	
1500	08-13	
1500	00-03 06densidad.crg	Sin pantalla, 150umx5mm, 5x300, T=10s, 1 fotos
1750	04-08	
2000	09-14	
2000	00-03 07densidad.crg	
2250	04-07	Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=10s, 1 foto
2500	08-13	
2500	00-03 08densidad.crg	
2750	04-07	
3000	08-13	Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=10s, 1 foto
3000	00-03 09densidad.crg	
3250	04-07	
3500	08-11	
3750	12-15	Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=60s, 1 foto
4000	16-19	
4250	20-23	
4500	24-28	
4750	29-35	
5000	36-41	
5000	00-03 10densidad.crg	
5500	04-07	
6000	08-11	
6500	12-15	
7000	16-19	
7500	20-23	
8000	24-27	
8500	28-31	
9000	32-35	
9500	36-40	
10000	41-44	

10500 45-48
 11000 49-52
 11500 53-56
 12000 57-61
 12500 62-66
 13000 67-71

Última posición de la tobera: -12999.89 um

[15/12/05]

13500 00-04 1ldensidad.crg Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=60s, 1 foto
 14000 05-10
 14500 11-16
 15000 17-22
 15500 23-28
 16000 29-35
 16500 36-42
 17000 43-49
 17500 50-57
 18000 58-65
 18500 66-71

Última posición de la tobera: -19500.16 um

Comentarios:

Mediante el método anterior no ha salido así que voy a intentar otro.
 En escala doble-logarítmica he

Como la serie fue tomada en dos días consecutivos, no tuve cuidado y se me olvidó tomar el punto 13000um el día 15 para escalar ambas medidas. Esto lo resolví representando la cola de la densidad de la penúltima y de la última serie. Haciendo dos ajustes lineales separados obtengo dos rectas prácticamente paralelas pero desplazadas una con respecto a la otra. Dividiendo dos puntos (uno de cada recta) a la misma distancia obtengo el valor que me permite escalar ambas series de datos. En realidad no importa mucho si la densidad absoluta así obtenida está o no bien puesto que en esta serie buscamos el comportamiento de la densidad, dejando la determinación de la densidad absoluta al procedimiento anterior a éste (la densidad obtenida en la serie de densidades relativas la transformamos en una función normalizada al primer punto de la expansión).

En esta serie sólo llegamos 18500um porque a esa distancia se fue la luz y pensé que no era necesario seguir adelante y tener que reajustar todo el experimento para tomar dos puntos tan alejados de la tobera, que no iban a aportar nada nuevo.

D.2. Expansión de 1000 mbar

FECHAS DE LOS EXPERIMENTOS:

- 12/12/05: Poblaciones
- 05,07/12/05: Densidades absolutas
- 09/12/05: Densidades relativas

DATOS REFERENTES A LOS EXPERIMENTOS:

Diámetro de tobera: 313 um

Presión en precámara medido con el Sensotec:

- Poblaciones: 55.20(0.05) mbar
- Densidades absolutas [05/12/05]: 66-67 mbar
 [07/12/05]: 56.00(0.05) mbar
- Densidades relativas: 50.30(0.05) mbar

Presión atmosférica medida con el barómetro del Rocasolano:

- Poblaciones: 944.75(0.05) mbar
- Densidades absolutas [05/12/05]: 936.35(0.10) mbar
 [07/12/05]: 945.25(0.05) mbar
- Densidades relativas: 949.70(0.05) mbar

Temperatura de precámara:

- Poblaciones: 297.0(0.5) K
- Densidades absolutas [05/12/05]: ----(---) K (no apunté el valor)
 [07/12/05]: 296.0(0.5) K
- Densidades relativas: 296.5(0.5) K

Potencia de láser: 5.8W@514.5nm

Ángulo de la lámina de semionda:

- Poblaciones: 132.4°

- Densidades absolutas [05/12/05]: 85.9°
[07/12/05]: 87.0°
- Densidades relativas: 87.9°

CONDICIONES EXPERIMENTALES:

- Poblaciones:
 - 50-100um -> S=50umx1mm, Agrup=5x20, T=10s, Con pantalla
 - 150-200um -> S=50umx1mm, Agrup=5x40, T=10s, Sin pantalla
 - 250-400um -> S=50umx1mm, Agrup=5x74, T=10s
 - 500-700um -> S=50umx2mm, Agrup=5x148, T=10s
 - 800-1000um -> S=100umx5mm, Agrup=5x250, T=10s
 - 1250-3000um -> S=150umx5mm, Agrup=5x370, T=10s
 - 3250-4750um -> S=150umx5mm, Agrup=5x370, T=30s
 - 5000-19500um -> S=150umx5mm, Agrup=5x370, T=60s
(S es la rendija de entrada al monocromador)
- Densidades absolutas: Medidas hechas a 300, 900, 3000, 6000, 9000, 12000, 15000 y 18000 um.
- Densidades relativas:
 - 50-100um -> S=50umx1mm, Agrup=5x20, T=10s, Con pantalla
 - 100-200um -> S=50umx1mm, Agrup=5x40, T=10s, Sin pantalla
 - 200-400um -> S=50umx1mm, Agrup=5x77, T=10s
 - 400-600um -> S=100umx2mm, Agrup=5x140, T=10s
 - 600-900um -> S=150umx5mm, Agrup=5x300, T=10s
 - 900-2000um -> S=150umx5mm, Agrup=5x370, T=10s
 - 2000-5000um -> S=150umx5mm, Agrup=5x370, T=30s
 - 5000-19500um -> S=150umx5mm, Agrup=5x370, T=60s

z micras A	P00exp adim B	P00fit adim C	P00exp-P00fit adim D	dP00fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP00fit/dt sec-1 G
50.	0.02483(0.00339)	0.02492	-0.00009	43.1(0.0)	470.1	20275.(0.)
100.	0.02755(0.00259)	0.02715	0.00040	45.8(0.8)	523.2	23963.(428.)
150.	0.03046(0.00125)	0.02950	0.00096	48.5(2.8)	566.9	27478.(1579.)
200.	0.03043(0.00087)	0.03199	-0.00156	51.1(6.6)	599.3	30648.(3936.)
250.	0.03419(0.00059)	0.03462	-0.00043	53.8(5.5)	620.3	33378.(3400.)
300.	0.03740(0.00112)	0.03748	-0.00008	56.3(4.7)	637.2	35893.(2994.)
400.	0.04406(0.00127)	0.04353	0.00053	61.4(3.4)	662.7	40657.(2236.)
500.	0.05006(0.00042)	0.05021	-0.00015	65.3(1.8)	680.8	44429.(1251.)
600.	0.05633(0.00061)	0.05680	-0.00047	64.7(3.7)	694.1	44922.(2545.)
700.	0.06331(0.00159)	0.06333	-0.00002	64.5(4.0)	704.3	45448.(2813.)
800.	0.07027(0.00066)	0.06991	0.00036	64.1(3.2)	712.3	45687.(2254.)
900.	0.07648(0.00111)	0.07649	-0.00001	64.0(1.1)	718.8	45982.(766.)
1000.	0.08230(0.00083)	0.08277	-0.00047	62.8(0.8)	724.2	45494.(585.)
1250.	0.09830(0.00146)	0.09803	0.00027	59.1(1.5)	734.3	43404.(1087.)
1500.	0.11252(0.00141)	0.11222	0.00030	55.7(1.4)	741.5	41294.(1003.)
1750.	0.12546(0.00174)	0.12605	-0.00059	52.0(1.6)	746.8	38811.(1190.)
2000.	0.13860(0.00253)	0.13841	0.00019	48.7(2.1)	750.9	36539.(1560.)
2250.	0.14996(0.00312)	0.14986	0.00010	45.5(1.6)	754.1	34296.(1185.)
2500.	0.16182(0.00698)	0.16068	0.00114	42.9(1.3)	756.8	32452.(947.)
2750.	0.16933(0.00308)	0.17072	-0.00139	41.1(3.3)	759.0	31187.(2473.)
3000.	0.18072(0.00447)	0.18044	0.00028	39.4(2.7)	760.8	29983.(2058.)
3250.	0.18998(0.00137)	0.19025	-0.00027	37.6(2.3)	762.4	28689.(1760.)
3500.	0.19901(0.00387)	0.19970	-0.00069	35.6(2.7)	763.7	27218.(2052.)
3750.	0.20952(0.00201)	0.20933	0.00019	32.7(2.5)	764.9	25005.(1946.)
4000.	0.21796(0.00166)	0.21656	0.00140	30.8(2.3)	766.0	23600.(1778.)
4250.	0.22430(0.00318)	0.22316	0.00114	29.9(2.2)	766.9	22953.(1686.)
4500.	0.23072(0.00398)	0.23005	0.00067	28.6(3.1)	767.8	21967.(2359.)
4750.	0.23252(0.00374)	0.23743	-0.00491	27.2(4.1)	768.5	20880.(3142.)
5000.	0.24481(0.00247)	0.24480	0.00001	26.9(2.5)	769.2	20691.(1902.)
5500.	0.25924(0.00245)	0.25787	0.00137	25.8(1.7)	770.4	19853.(1337.)
6000.	0.27258(0.00243)	0.27068	0.00190	24.1(1.9)	771.4	18568.(1456.)
6500.	0.28112(0.00307)	0.28170	-0.00058	22.6(1.4)	772.3	17439.(1072.)
7000.	0.28986(0.00436)	0.29184	-0.00198	20.1(0.9)	773.1	15501.(661.)
7500.	0.30221(0.00827)	0.30081	0.00140	18.9(1.1)	773.8	14656.(884.)
8000.	0.30857(0.00408)	0.31044	-0.00187	17.2(1.3)	774.3	13310.(1039.)
8500.	0.32110(0.00586)	0.31911	0.00199	16.3(0.9)	774.9	12615.(680.)
9000.	0.32551(0.02581)	0.32710	-0.00159	14.9(1.0)	775.3	11513.(785.)
9500.	0.33691(0.01649)	0.33354	0.00337	13.6(1.6)	775.7	10550.(1257.)
10000.	0.33711(0.00861)	0.33997	-0.00286	12.8(1.3)	776.1	9926.(1035.)
10500.	0.34622(0.00381)	0.34615	0.00007	10.6(1.0)	776.4	8238.(812.)
11000.	0.34998(0.00444)	0.35070	-0.00072	10.7(2.3)	776.7	8318.(1804.)
11500.	0.35767(0.01299)	0.35532	0.00235	10.1(1.9)	777.0	7840.(1487.)
12000.	0.36251(0.01483)	0.36145	0.00106	9.5(1.9)	777.3	7363.(1446.)
12500.	0.35933(0.01431)	0.36519	-0.00586	8.9(1.6)	777.5	6910.(1209.)
13000.	0.37348(0.01041)	0.37132	0.00216	6.0(2.4)	777.7	4683.(1886.)
13500.	0.37561(0.01383)	0.37354	0.00207	4.3(2.8)	777.9	3373.(2160.)
14000.	0.37394(0.01329)	0.37572	-0.00178	2.4(2.3)	778.0	1835.(1821.)
14500.	0.38319(0.00775)	0.37514	0.00805	2.7(3.6)	778.2	2093.(2821.)
15000.	0.36622(0.01350)	0.37532	-0.00910	-0.7(4.6)	778.3	-574.(3544.)
15500.	0.37536(0.00831)	0.37500	0.00036	-2.1(3.4)	778.5	-1605.(2646.)
16000.	0.36991(0.00840)	0.37358	-0.00367	-2.5(2.8)	778.6	-1952.(2182.)
16500.	0.38423(0.01801)	0.37431	0.00992	-7.4(3.0)	778.7	-5739.(2359.)
17000.	0.36546(0.01160)	0.37123	-0.00577	-7.9(2.9)	778.8	-6120.(2291.)

17500.	0.36506(0.01614)	0.36424	0.00082	-11.0(4.0)	778.9	-8568.(3098.)
18000.	0.36690(0.02118)	0.35814	0.00876	-13.4(5.1)	779.0	-10446.(4012.)
18500.	0.33367(0.01933)	0.35083	-0.01716	-15.8(3.6)	779.1	-12325.(2815.)
19000.	0.34485(0.03228)	0.34232	0.00253	-18.2(4.1)	779.2	-14205.(3167.)
19500.	0.33658(0.01387)	0.33260	0.00398	-20.6(0.0)	779.3	-16085.(0.)

z micras A	P01exp adim B	P01fit adim C	P01exp-P01fit adim D	dP01fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP01fit/dt sec-1 G
50.	0.03376(0.00153)	0.03512	-0.00136	74.1(0.0)	470.1	34825.(0.)
100.	0.04078(0.00336)	0.03886	0.00192	75.6(1.7)	523.2	39554.(874.)
150.	0.04405(0.00207)	0.04268	0.00137	77.1(3.1)	566.9	43719.(1776.)
200.	0.04495(0.00039)	0.04657	-0.00162	78.7(7.7)	599.3	47135.(4624.)
250.	0.05007(0.00078)	0.05055	-0.00048	80.2(9.3)	620.3	49729.(5794.)
300.	0.05379(0.00119)	0.05469	-0.00090	78.4(8.1)	637.2	49982.(5145.)
400.	0.06402(0.00073)	0.06297	0.00105	83.4(3.4)	662.7	55249.(2249.)
500.	0.07163(0.00228)	0.07190	-0.00027	85.2(1.8)	680.8	57991.(1238.)
600.	0.08025(0.00095)	0.08058	-0.00033	80.5(4.5)	694.1	55896.(3155.)
700.	0.08768(0.00185)	0.08803	-0.00035	78.3(5.1)	704.3	55126.(3579.)
800.	0.09703(0.00068)	0.09554	0.00149	74.8(4.2)	712.3	53259.(3003.)
900.	0.10355(0.00113)	0.10317	0.00038	72.8(2.3)	718.8	52357.(1681.)
1000.	0.10805(0.00192)	0.11011	-0.00206	69.5(2.7)	724.2	50368.(1985.)
1250.	0.12747(0.00077)	0.12657	0.00090	63.5(2.0)	734.3	46599.(1455.)
1500.	0.14261(0.00229)	0.14188	0.00073	57.4(2.6)	741.5	42577.(1921.)
1750.	0.15446(0.00179)	0.15577	-0.00131	51.8(2.5)	746.8	38647.(1863.)
2000.	0.16794(0.00314)	0.16743	0.00051	47.5(2.7)	750.9	35675.(2006.)
2250.	0.17935(0.00248)	0.17808	0.00127	42.1(1.7)	754.1	31785.(1272.)
2500.	0.18711(0.00457)	0.18773	-0.00062	38.7(2.7)	756.8	29281.(2027.)
2750.	0.19455(0.00411)	0.19681	-0.00226	35.9(3.6)	759.0	27256.(2726.)
3000.	0.20743(0.00317)	0.20526	0.00217	32.4(2.1)	760.8	24680.(1577.)
3250.	0.21207(0.00208)	0.21315	-0.00108	29.7(1.5)	762.4	22666.(1160.)
3500.	0.22094(0.00297)	0.22054	0.00040	27.7(2.8)	763.7	21139.(2141.)
3750.	0.22792(0.00500)	0.22708	0.00084	25.0(3.6)	764.9	19153.(2724.)
4000.	0.23185(0.00499)	0.23257	-0.00072	21.4(2.4)	766.0	16415.(1848.)
4250.	0.23721(0.00361)	0.23805	-0.00084	19.1(1.4)	766.9	14632.(1087.)
4500.	0.24273(0.00238)	0.24092	0.00181	17.4(1.2)	767.8	13321.(926.)
4750.	0.24668(0.00355)	0.24484	0.00184	16.1(1.9)	768.5	12350.(1436.)
5000.	0.24862(0.00227)	0.24934	-0.00072	15.7(2.5)	769.2	12100.(1928.)
5500.	0.25198(0.00200)	0.25701	-0.00503	14.5(3.8)	770.4	11132.(2937.)
6000.	0.26726(0.00404)	0.26476	0.00250	12.9(1.7)	771.4	9912.(1296.)
6500.	0.27246(0.00125)	0.27067	0.00179	11.5(1.9)	772.3	8858.(1490.)
7000.	0.27561(0.00660)	0.27567	-0.00006	10.7(1.4)	773.1	8303.(1099.)
7500.	0.28134(0.00797)	0.28090	0.00044	9.1(1.3)	773.8	7067.(967.)
8000.	0.28047(0.00709)	0.28379	-0.00332	7.0(1.1)	774.3	5445.(887.)
8500.	0.28709(0.00591)	0.28727	-0.00018	6.2(2.9)	774.9	4840.(2217.)
9000.	0.29404(0.00659)	0.29085	0.00319	5.0(2.8)	775.3	3847.(2189.)
9500.	0.29186(0.01383)	0.29272	-0.00086	4.2(2.0)	775.7	3288.(1547.)
10000.	0.29480(0.00980)	0.29485	-0.00005	3.6(1.7)	776.1	2796.(1345.)
10500.	0.29626(0.01677)	0.29395	0.00231	4.6(3.0)	776.4	3575.(2356.)
11000.	0.29328(0.00961)	0.29635	-0.00307	4.3(4.8)	776.7	3317.(3755.)
11500.	0.29875(0.02121)	0.29949	-0.00074	5.0(3.7)	777.0	3922.(2897.)
12000.	0.29802(0.01149)	0.30338	-0.00536	3.9(4.4)	777.3	3003.(3456.)
12500.	0.31558(0.01798)	0.30617	0.00941	3.1(6.0)	777.5	2373.(4656.)
13000.	0.30605(0.01043)	0.30887	-0.00282	1.1(4.8)	777.7	831.(3695.)
13500.	0.31043(0.02101)	0.30747	0.00296	-0.4(3.4)	777.9	-319.(2650.)
14000.	0.30255(0.01250)	0.30392	-0.00137	1.0(3.9)	778.0	767.(3032.)
14500.	0.30435(0.03453)	0.30312	0.00123	-0.9(4.8)	778.2	-681.(3698.)
15000.	0.29612(0.01512)	0.30556	-0.00944	-1.1(7.9)	778.3	-828.(6180.)
15500.	0.30359(0.01618)	0.30395	-0.00036	0.1(5.5)	778.5	81.(4257.)
16000.	0.32089(0.01452)	0.30635	0.01454	-0.2(4.0)	778.6	-143.(3111.)
16500.	0.30291(0.01932)	0.30626	-0.00335	-1.1(3.8)	778.7	-834.(2964.)
17000.	0.29473(0.02522)	0.30836	-0.01363	-5.6(3.7)	778.8	-4324.(2858.)
17500.	0.31160(0.03127)	0.30261	0.00899	-9.5(6.5)	778.9	-7415.(5028.)
18000.	0.29660(0.02563)	0.29697	-0.00037	-13.1(4.9)	779.0	-10166.(3844.)
18500.	0.29849(0.02547)	0.28956	0.00893	-16.6(5.7)	779.1	-12925.(4447.)
19000.	0.26828(0.03016)	0.28038	-0.01210	-20.1(3.7)	779.2	-15678.(2848.)
19500.	0.27339(0.01518)	0.26944	0.00395	-23.6(0.0)	779.3	-18430.(0.)

z micras A	P02exp adim B	P02fit adim C	P02exp-P02fit adim D	dP02fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP02fit/dt sec-1 G
50.	0.10528(0.00616)	0.10538	-0.00010	220.4(0.0)	470.1	103610.(0.)
100.	0.11760(0.00337)	0.11635	0.00125	218.5(2.7)	523.2	114319.(1416.)
150.	0.12941(0.00256)	0.12722	0.00219	216.5(7.8)	566.9	122734.(4438.)
200.	0.13395(0.00064)	0.13800	-0.00405	214.6(15.5)	599.3	128610.(9319.)
250.	0.14790(0.00244)	0.14868	-0.00078	212.6(12.6)	620.3	131876.(7847.)
300.	0.15825(0.00380)	0.15956	-0.00131	210.7(9.7)	637.2	134258.(6210.)
400.	0.18243(0.00151)	0.18077	0.00166	206.3(4.2)	662.7	136715.(2768.)
500.	0.20249(0.00184)	0.20169	0.00080	199.2(5.8)	680.8	135615.(3918.)
600.	0.21908(0.00204)	0.22077	-0.00169	182.3(7.5)	694.1	126534.(5198.)
700.	0.23790(0.00337)	0.23776	0.00014	169.6(8.6)	704.3	119449.(6056.)
800.	0.25491(0.00145)	0.25403	0.00088	154.7(8.2)	712.3	110193.(5857.)
900.	0.26925(0.00426)	0.26820	0.00105	142.3(9.5)	718.8	102285.(6828.)
1000.	0.28097(0.00162)	0.28170	-0.00073	131.1(10.9)	724.2	94943.(7858.)

1250.	0.31238(0.00046)	0.30976	0.00262	103.5(9.5)	734.3	76000.(6994.)
1500.	0.33097(0.00334)	0.33209	-0.00112	81.4(10.3)	741.5	60388.(7615.)
1750.	0.35112(0.00196)	0.34880	0.00232	63.7(11.3)	746.8	47549.(8416.)
2000.	0.36018(0.00207)	0.36204	-0.00186	47.7(11.1)	750.9	35833.(8312.)
2250.	0.37132(0.00458)	0.37021	0.00111	34.5(9.2)	754.1	26009.(6921.)
2500.	0.37516(0.00333)	0.37636	-0.00120	25.2(9.8)	756.8	19056.(7448.)
2750.	0.38205(0.00524)	0.38024	0.00181	16.9(9.3)	759.0	12812.(7074.)
3000.	0.38051(0.00312)	0.38341	-0.00290	11.3(9.1)	760.8	8597.(6925.)
3250.	0.38534(0.00488)	0.38475	0.00059	6.7(6.1)	762.4	5080.(4632.)
3500.	0.38687(0.00333)	0.38583	0.00104	3.7(4.6)	763.7	2846.(3482.)
3750.	0.38607(0.00326)	0.38550	0.00057	2.1(3.9)	764.9	1641.(2985.)
4000.	0.38481(0.00571)	0.38691	-0.00210	-1.1(3.6)	766.0	-835.(2772.)
4250.	0.38547(0.00739)	0.38582	-0.00035	-4.3(3.5)	766.9	-3292.(2666.)
4500.	0.38424(0.00683)	0.38431	-0.00007	-6.5(3.7)	767.8	-4976.(2808.)
4750.	0.38775(0.01890)	0.38176	0.00599	-8.2(3.9)	768.5	-6266.(2967.)
5000.	0.37608(0.00656)	0.37878	-0.00270	-10.2(2.4)	769.2	-7838.(1808.)
5500.	0.37266(0.00268)	0.37224	0.00042	-12.5(2.1)	770.4	-9622.(1598.)
6000.	0.36444(0.00526)	0.36616	-0.00172	-13.4(2.7)	771.4	-10368.(2101.)
6500.	0.35975(0.00145)	0.35917	0.00058	-14.0(2.1)	772.3	-10797.(1605.)
7000.	0.35311(0.00988)	0.35311	0.00000	-13.6(2.0)	773.1	-10537.(1529.)
7500.	0.34792(0.00914)	0.34567	0.00225	-14.3(1.3)	773.8	-11058.(973.)
8000.	0.33649(0.00659)	0.33767	-0.00118	-13.4(1.4)	774.3	-10414.(1060.)
8500.	0.33074(0.00614)	0.33072	0.00002	-13.7(1.3)	774.9	-10624.(982.)
9000.	0.32220(0.00370)	0.32343	-0.00123	-12.8(2.0)	775.3	-9908.(1551.)
9500.	0.31582(0.00219)	0.31747	-0.00165	-12.3(1.5)	775.7	-9533.(1180.)
10000.	0.31625(0.00652)	0.31234	0.00391	-11.3(0.7)	776.1	-8785.(549.)
10500.	0.30418(0.00567)	0.30632	-0.00214	-10.2(0.9)	776.4	-7896.(674.)
11000.	0.30389(0.00976)	0.30190	0.00199	-9.6(1.7)	776.7	-7482.(1290.)
11500.	0.29497(0.01143)	0.29690	-0.00193	-9.1(1.4)	777.0	-7089.(1050.)
12000.	0.29048(0.01326)	0.29211	-0.00163	-9.1(2.1)	777.3	-7038.(1614.)
12500.	0.29174(0.00543)	0.28802	0.00372	-7.1(1.8)	777.5	-5498.(1433.)
13000.	0.28320(0.01368)	0.28376	-0.00056	-5.8(1.4)	777.7	-4490.(1066.)
13500.	0.28176(0.01937)	0.28266	-0.00090	-5.3(1.1)	777.9	-4131.(847.)
14000.	0.27631(0.03246)	0.28073	-0.00442	-5.8(2.1)	778.0	-4478.(1603.)
14500.	0.28026(0.00809)	0.27815	0.00211	-6.8(4.7)	778.2	-5279.(3640.)
15000.	0.28120(0.01221)	0.27442	0.00678	-5.3(4.5)	778.3	-4130.(3505.)
15500.	0.26957(0.03077)	0.27088	-0.00131	-4.8(3.4)	778.5	-3725.(2655.)
16000.	0.26531(0.02841)	0.26790	-0.00259	-3.8(3.3)	778.6	-2982.(2595.)
16500.	0.25916(0.02962)	0.26390	-0.00474	-1.8(4.0)	778.7	-1406.(3130.)
17000.	0.26852(0.02710)	0.26458	0.00394	-0.6(2.9)	778.8	-457.(2246.)
17500.	0.26624(0.01335)	0.26765	-0.00141	0.8(2.8)	778.9	638.(2185.)
18000.	0.26704(0.02478)	0.26802	-0.00098	0.7(4.8)	779.0	519.(3741.)
18500.	0.27820(0.02356)	0.26831	0.00989	0.5(6.9)	779.1	400.(5369.)
19000.	0.26769(0.01388)	0.26853	-0.00084	0.4(5.1)	779.2	280.(3965.)
19500.	0.26478(0.02648)	0.26867	-0.00389	0.2(0.0)	779.3	161.(0.)

z micras A	P03exp adim B	P03fit adim C	P03exp-P03fit adim D	dP03fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP03fit/dt sec-1 G
50.	0.06558(0.00262)	0.06439	0.00119	127.5(0.0)	470.1	59938.(0.)
100.	0.06950(0.00065)	0.07065	-0.00115	122.7(6.6)	523.2	64197.(3468.)
150.	0.07716(0.00113)	0.07666	0.00050	117.8(5.4)	566.9	66781.(3050.)
200.	0.08150(0.00323)	0.08243	-0.00093	113.0(5.0)	599.3	67721.(2997.)
250.	0.08755(0.00155)	0.08796	-0.00041	108.1(3.8)	620.3	67054.(2375.)
300.	0.09320(0.00232)	0.09368	-0.00048	106.6(4.5)	637.2	67926.(2883.)
400.	0.10349(0.00199)	0.10349	0.00000	92.2(5.9)	662.7	61074.(3907.)
500.	0.11342(0.00261)	0.11210	0.00132	79.8(7.5)	680.8	54348.(5127.)
600.	0.11885(0.00143)	0.11911	-0.00026	66.5(8.0)	694.1	46144.(5582.)
700.	0.12422(0.00332)	0.12462	-0.00040	55.3(8.7)	704.3	38955.(6099.)
800.	0.12951(0.00288)	0.12917	0.00034	44.3(9.5)	712.3	31562.(6748.)
900.	0.13298(0.00110)	0.13270	0.00028	34.2(9.8)	718.8	24583.(7039.)
1000.	0.13606(0.00244)	0.13492	0.00114	25.9(9.8)	724.2	18764.(7104.)
1250.	0.14008(0.00101)	0.13903	0.00105	11.3(8.8)	734.3	8290.(6455.)
1500.	0.13990(0.00136)	0.13916	0.00074	0.2(7.4)	741.5	140.(5514.)
1750.	0.13681(0.00210)	0.13746	-0.00065	-7.4(8.1)	746.8	-5517.(6028.)
2000.	0.13504(0.00128)	0.13409	0.00095	-12.8(7.5)	750.9	-9619.(5649.)
2250.	0.12795(0.00330)	0.12929	-0.00134	-16.4(7.1)	754.1	-12397.(5341.)
2500.	0.12504(0.00177)	0.12441	0.00063	-18.6(5.5)	756.8	-14099.(4133.)
2750.	0.11872(0.00246)	0.11927	-0.00055	-19.7(4.8)	759.0	-14922.(3671.)
3000.	0.11369(0.00386)	0.11371	-0.00002	-19.7(4.1)	760.8	-14973.(3121.)
3250.	0.10965(0.00184)	0.10905	0.00060	-19.2(2.9)	762.4	-14608.(2190.)
3500.	0.10339(0.00399)	0.10407	-0.00068	-19.2(2.3)	763.7	-14663.(1763.)
3750.	0.09883(0.00460)	0.09948	-0.00065	-18.4(2.2)	764.9	-14059.(1692.)
4000.	0.09616(0.00507)	0.09445	0.00171	-16.6(1.4)	766.0	-12677.(1077.)
4250.	0.09028(0.00255)	0.09040	-0.00012	-15.2(1.5)	766.9	-11657.(1158.)
4500.	0.08585(0.00354)	0.08789	-0.00204	-14.4(1.4)	767.8	-11087.(1087.)
4750.	0.08216(0.00383)	0.08433	-0.00217	-13.9(1.7)	768.5	-10667.(1318.)
5000.	0.08316(0.00371)	0.08046	0.00270	-13.6(2.1)	769.2	-10492.(1622.)
5500.	0.07720(0.00257)	0.07402	0.00318	-12.4(2.5)	770.4	-9514.(1923.)
6000.	0.06471(0.00059)	0.06720	-0.00249	-11.3(1.5)	771.4	-8686.(1159.)
6500.	0.06087(0.00427)	0.06198	-0.00111	-10.3(1.4)	772.3	-7962.(1080.)
7000.	0.05773(0.00221)	0.05733	0.00040	-10.0(1.3)	773.1	-7754.(983.)
7500.	0.05200(0.00349)	0.05273	-0.00073	-8.4(1.1)	773.8	-6533.(862.)
8000.	0.05287(0.00748)	0.04966	0.00321	-6.9(1.1)	774.3	-5306.(874.)
8500.	0.04625(0.00314)	0.04606	0.00019	-6.2(2.8)	774.9	-4840.(2181.)

9000.	0.03929 (0.00441)	0.04248	-0.00319	-5.0 (2.8)	775.3	-3848.(2179.)
9500.	0.04147 (0.00668)	0.04061	0.00086	-4.2 (1.9)	775.7	-3289.(1478.)
10000.	0.03853 (0.00880)	0.03848	0.00005	-3.6 (1.8)	776.1	-2796.(1374.)
10500.	0.03707 (0.01258)	0.03938	-0.00231	-4.6 (3.0)	776.4	-3575.(2356.)
11000.	0.04006 (0.01234)	0.03699	0.00307	-4.3 (4.8)	776.7	-3317.(3755.)
11500.	0.03458 (0.01006)	0.03385	0.00073	-5.0 (3.7)	777.0	-3921.(2897.)
12000.	0.03531 (0.00988)	0.02996	0.00535	-3.9 (4.4)	777.3	-3002.(3456.)
12500.	0.01776 (0.00784)	0.02716	-0.00940	-3.1 (6.0)	777.5	-2373.(4656.)
13000.	0.02728 (0.00761)	0.02446	0.00282	-1.1 (5.1)	777.7	-831.(3942.)
13500.	0.02291 (0.02297)	0.02586	-0.00295	0.4 (3.5)	777.9	319.(2738.)
14000.	0.03078 (0.02356)	0.02942	0.00136	-1.0 (4.5)	778.0	-767.(3523.)
14500.	0.02899 (0.01661)	0.03022	-0.00123	0.9 (6.1)	778.2	681.(4748.)
15000.	0.03721 (0.01539)	0.02918	0.00803	-1.0 (7.9)	778.3	-769.(6159.)
15500.	0.02975 (0.02152)	0.02845	0.00130	-1.6 (5.5)	778.5	-1279.(4301.)
16000.	0.01245 (0.01594)	0.02438	-0.01193	-0.8 (3.0)	778.6	-656.(2375.)
16500.	0.03042 (0.00952)	0.02348	0.00694	0.6 (4.4)	778.7	435.(3421.)
17000.	0.02321 (0.02174)	0.02261	0.00060	3.3 (5.2)	778.8	2536.(4040.)
17500.	0.02174 (0.02761)	0.02609	-0.00435	8.3 (6.8)	778.9	6473.(5326.)
18000.	0.03674 (0.02497)	0.03128	0.00546	12.4 (2.5)	779.0	9699.(1962.)
18500.	0.03485 (0.02740)	0.03854	-0.00369	16.6 (2.5)	779.1	12933.(1964.)
19000.	0.04784 (0.02498)	0.04787	-0.00003	20.7 (0.7)	779.2	16161.(536.)
19500.	0.05994 (0.01792)	0.05928	0.00066	24.9 (0.0)	779.3	19397.(0.)
z micras A	P04exp adim B	P04fit adim C	P04exp-P04fit adim D	dP04fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP04fit/dt sec-1 G
50.	0.14993 (0.00327)	0.14793	0.00200	252.9 (0.0)	470.1	118888.(0.)
100.	0.15710 (0.00544)	0.16005	-0.00295	231.8 (9.8)	523.2	121278.(5143.)
150.	0.17073 (0.00524)	0.17111	-0.00038	210.6 (10.5)	566.9	119389.(5930.)
200.	0.18337 (0.00275)	0.18111	0.00226	189.5 (13.9)	599.3	113567.(8330.)
250.	0.18996 (0.00189)	0.19006	-0.00010	168.4 (16.3)	620.3	104459.(10111.)
300.	0.19463 (0.00840)	0.19855	-0.00392	152.6 (25.0)	637.2	97237.(15943.)
400.	0.21511 (0.00253)	0.21006	0.00505	103.2 (27.9)	662.7	68391.(18522.)
500.	0.21656 (0.00359)	0.21747	-0.00091	64.7 (27.5)	680.8	44061.(18742.)
600.	0.22342 (0.00347)	0.22167	0.00175	35.1 (29.8)	694.1	24356.(20649.)
700.	0.21980 (0.01035)	0.22241	-0.00261	9.4 (30.7)	704.3	6608.(21594.)
800.	0.22164 (0.00302)	0.21942	0.00222	-16.7 (27.2)	712.3	-11924.(19367.)
900.	0.21786 (0.00347)	0.21541	0.00245	-31.1 (22.9)	718.8	-22376.(16432.)
1000.	0.21389 (0.00251)	0.21027	0.00362	-47.1 (20.5)	724.2	-34088.(14839.)
1250.	0.19370 (0.00227)	0.19492	-0.00122	-59.2 (21.7)	734.3	-43485.(15934.)
1500.	0.17933 (0.00391)	0.17767	0.00166	-63.8 (15.2)	741.5	-47308.(11263.)
1750.	0.16226 (0.00429)	0.16136	0.00090	-62.0 (14.3)	746.8	-46324.(10642.)
2000.	0.14333 (0.00414)	0.14596	-0.00263	-58.5 (11.2)	750.9	-43898.(8418.)
2250.	0.13216 (0.00422)	0.13207	0.00009	-54.0 (6.3)	754.1	-40752.(4783.)
2500.	0.11999 (0.00332)	0.11890	0.00109	-50.4 (1.8)	756.8	-38112.(1391.)
2750.	0.10716 (0.00474)	0.10710	0.00006	-45.4 (0.8)	759.0	-34428.(597.)
3000.	0.09675 (0.00373)	0.09688	-0.00013	-41.3 (0.9)	760.8	-31406.(662.)
3250.	0.08635 (0.00237)	0.08649	-0.00014	-38.0 (1.7)	762.4	-28956.(1286.)
3500.	0.07693 (0.00129)	0.07739	-0.00046	-34.0 (2.4)	763.7	-25989.(1821.)
3750.	0.07069 (0.00469)	0.06960	0.00109	-30.2 (2.4)	764.9	-23085.(1805.)
4000.	0.06135 (0.00241)	0.06230	-0.00095	-25.9 (2.0)	766.0	-19816.(1533.)
4250.	0.05689 (0.00284)	0.05717	-0.00028	-23.2 (2.1)	766.9	-17784.(1647.)
4500.	0.05170 (0.00522)	0.05207	-0.00037	-20.5 (1.7)	767.8	-15748.(1276.)
4750.	0.04639 (0.00266)	0.04732	-0.00093	-18.3 (2.4)	768.5	-14102.(1806.)
5000.	0.04577 (0.00146)	0.04310	0.00267	-15.8 (2.4)	769.2	-12176.(1875.)
5500.	0.03477 (0.00300)	0.03656	-0.00179	-13.3 (1.6)	770.4	-10231.(1257.)
6000.	0.02965 (0.00192)	0.02983	-0.00018	-10.6 (1.7)	771.4	-8200.(1293.)
6500.	0.02581 (0.00098)	0.02581	0.00000	-8.6 (1.6)	772.3	-6639.(1238.)
7000.	0.02370 (0.00077)	0.02172	0.00198	-6.4 (1.4)	773.1	-4961.(1089.)
7500.	0.01653 (0.00582)	0.02019	-0.00366	-4.7 (1.4)	773.8	-3598.(1076.)
8000.	0.02160 (0.00412)	0.01855	0.00305	-3.7 (1.9)	774.3	-2895.(1443.)
8500.	0.01483 (0.00557)	0.01683	-0.00200	-2.6 (1.5)	774.9	-1993.(1124.)
9000.	0.01895 (0.01068)	0.01613	0.00282	-2.1 (1.8)	775.3	-1599.(1426.)
9500.	0.01393 (0.00784)	0.01566	-0.00173	-1.3 (1.3)	775.7	-1012.(978.)
10000.	0.01331 (0.00888)	0.01436	-0.00105	-1.5 (1.1)	776.1	-1139.(867.)
10500.	0.01627 (0.00904)	0.01419	0.00208	-0.4 (0.8)	776.4	-337.(648.)
11000.	0.01280 (0.00525)	0.01407	-0.00127	-1.1 (1.0)	776.7	-837.(746.)
11500.	0.01403 (0.00910)	0.01445	-0.00042	-1.0 (2.1)	777.0	-749.(1628.)
12000.	0.01368 (0.01517)	0.01311	0.00057	-0.4 (3.5)	777.3	-325.(2733.)
12500.	0.01560 (0.01381)	0.01346	0.00214	-1.8 (2.1)	777.5	-1412.(1627.)
13000.	0.00999 (0.00846)	0.01159	-0.00160	-0.2 (1.8)	777.7	-194.(1427.)
13500.	0.00930 (0.01145)	0.01047	-0.00117	1.0 (2.7)	777.9	756.(2117.)
14000.	0.01642 (0.01980)	0.01022	0.00620	3.4 (3.4)	778.0	2642.(2676.)
14500.	0.00321 (0.01852)	0.01337	-0.01016	4.1 (3.9)	778.2	3184.(3065.)
15000.	0.01924 (0.01380)	0.01692	0.00232	6.0 (2.8)	778.3	4704.(2143.)
15500.	0.02174 (0.01764)	0.02079	0.00095	6.8 (3.6)	778.5	5330.(2775.)
16000.	0.03144 (0.02273)	0.02519	0.00625	6.3 (4.2)	778.6	4934.(3307.)
16500.	0.02328 (0.01482)	0.02845	-0.00517	9.2 (2.6)	778.7	7146.(2018.)
17000.	0.03269 (0.01737)	0.03086	0.00183	8.4 (1.6)	778.8	6578.(1283.)
17500.	0.03536 (0.03474)	0.03478	0.00058	10.2 (2.8)	778.9	7929.(2216.)
18000.	0.03273 (0.02217)	0.04051	-0.00778	12.7 (4.6)	779.0	9924.(3597.)
18500.	0.05480 (0.04572)	0.04752	0.00728	15.3 (3.3)	779.1	11928.(2552.)
19000.	0.05413 (0.03236)	0.05582	-0.00169	17.9 (1.0)	779.2	13924.(796.)
19500.	0.06530 (0.01914)	0.06539	-0.00009	20.4 (0.0)	779.3	15921.(0.)

Sección D.2

Expansión de 1000 mbar

z micras A	P05exp adim B	P05fit adim C	P05exp-P05fit adim D	dP05fit/dz metros-l E	v m/s F	dP05fit/dt sec-l G
50.	0.07066(0.00320)	0.06951	0.00115	107.0(0.0)	470.1	50301.(0.)
100.	0.07214(0.00399)	0.07450	-0.00236	92.3(0.2)	523.2	48307.(87.)
150.	0.07790(0.00383)	0.07874	-0.00084	77.7(12.0)	566.9	44020.(6774.)
200.	0.08401(0.00279)	0.08226	0.00175	63.0(20.3)	599.3	37732.(12148.)
250.	0.08665(0.00167)	0.08504	0.00161	48.3(22.1)	620.3	29948.(13727.)
300.	0.08690(0.00306)	0.08688	0.00002	36.2(23.4)	637.2	23092.(14923.)
400.	0.08803(0.00349)	0.08795	0.00008	6.2(16.5)	662.7	4090.(10961.)
500.	0.08704(0.00009)	0.08654	0.00050	-13.9(13.3)	680.8	-9429.(9021.)
600.	0.08468(0.00220)	0.08391	0.00077	-24.9(14.8)	694.1	-17311.(10266.)
700.	0.07980(0.00327)	0.08026	-0.00046	-31.4(19.4)	704.3	-22080.(13656.)
800.	0.07618(0.00155)	0.07614	0.00004	-37.8(14.3)	712.3	-26896.(10207.)
900.	0.07185(0.00085)	0.07123	0.00062	-42.1(9.6)	718.8	-30297.(6888.)
1000.	0.06792(0.00049)	0.06682	0.00110	-43.6(6.5)	724.2	-31568.(4739.)
1250.	0.05598(0.00229)	0.05549	0.00049	-41.1(6.9)	734.3	-30194.(5078.)
1500.	0.04448(0.00136)	0.04557	-0.00109	-36.5(6.7)	741.5	-27043.(4995.)
1750.	0.03834(0.00194)	0.03697	0.00137	-30.4(4.3)	746.8	-22733.(3190.)
2000.	0.02865(0.00380)	0.03078	-0.00213	-26.0(4.1)	750.9	-19501.(3094.)
2250.	0.02603(0.00045)	0.02545	0.00058	-21.2(2.4)	754.1	-16002.(1846.)
2500.	0.02119(0.00193)	0.02125	-0.00006	-17.4(3.1)	756.8	-13161.(2330.)
2750.	0.02006(0.00310)	0.01749	0.00257	-14.9(4.1)	759.0	-11324.(3102.)
3000.	0.01222(0.00489)	0.01451	-0.00229	-12.3(3.0)	760.8	-9358.(2285.)
3250.	0.01162(0.00152)	0.01114	0.00048	-10.6(2.3)	762.4	-8059.(1755.)
3500.	0.00900(0.00273)	0.00873	0.00027	-8.5(1.7)	763.7	-6476.(1330.)
3750.	0.00659(0.00341)	0.00678	-0.00019	-6.7(1.2)	764.9	-5095.(916.)
4000.	0.00532(0.00366)	0.00631	-0.00099	-4.9(1.2)	766.0	-3741.(889.)
4250.	0.00584(0.00243)	0.00489	0.00095	-3.9(1.6)	766.9	-2970.(1196.)
4500.	0.00476(0.00361)	0.00452	0.00024	-2.9(2.4)	767.8	-2237.(1847.)
4750.	0.00449(0.00227)	0.00384	0.00065	-2.5(3.0)	768.5	-1916.(2317.)
5000.	0.00156(0.00275)	0.00327	-0.00171	-2.1(1.1)	769.2	-1594.(810.)
5500.	0.00415(0.00467)	0.00245	0.00170	-1.2(1.7)	770.4	-948.(1284.)
6000.	0.00136(0.00485)	0.00204	-0.00068	-0.4(0.0)	771.4	-299.(0.)
z micras A	P06exp adim B	P06fit adim C	P06exp-P06fit adim D	dP06fit/dz metros-l E	v m/s F	dP06fit/dt sec-l G
50.	0.13585(0.00240)	0.13805	-0.00220	72.4(0.0)	470.1	34045.(0.)
100.	0.14366(0.00519)	0.14115	0.00251	51.8(17.4)	523.2	27097.(9114.)
150.	0.13871(0.00462)	0.14323	-0.00452	31.2(17.9)	566.9	17665.(10165.)
200.	0.14949(0.00275)	0.14427	0.00522	10.5(35.0)	599.3	6311.(20952.)
250.	0.14576(0.00312)	0.14428	0.00148	-10.1(34.1)	620.3	-6265.(21146.)
300.	0.14472(0.00365)	0.14193	0.00279	-37.2(36.9)	637.2	-23723.(23513.)
400.	0.13371(0.00261)	0.13641	-0.00270	-64.2(27.5)	662.7	-42559.(18211.)
500.	0.12716(0.00314)	0.12679	0.00037	-92.2(16.8)	680.8	-62736.(11451.)
600.	0.11764(0.00325)	0.11624	0.00140	-98.8(23.1)	694.1	-68598.(16061.)
700.	0.10708(0.00037)	0.10449	0.00259	-99.6(21.4)	704.3	-70162.(15079.)
800.	0.09240(0.00180)	0.09384	-0.00144	-98.0(23.2)	712.3	-69784.(16554.)
900.	0.08194(0.00131)	0.08374	-0.00180	-97.3(15.8)	718.8	-69946.(11386.)
1000.	0.07430(0.00096)	0.07415	0.00015	-91.8(13.3)	724.2	-66503.(9639.)
1250.	0.05478(0.00181)	0.05493	-0.00015	-71.7(8.5)	734.3	-52657.(6259.)
1500.	0.03908(0.00138)	0.04018	-0.00110	-55.1(6.9)	741.5	-40864.(5149.)
1750.	0.02708(0.00247)	0.02852	-0.00144	-42.7(8.7)	746.8	-31858.(6491.)
2000.	0.02226(0.00332)	0.01961	0.00265	-31.7(9.3)	750.9	-23781.(6987.)
2250.	0.01323(0.00086)	0.01425	-0.00102	-22.7(6.6)	754.1	-17133.(4994.)
2500.	0.00969(0.00291)	0.01073	-0.00104	-16.0(6.0)	756.8	-12079.(4548.)
2750.	0.00813(0.00409)	0.00854	-0.00041	-12.0(7.8)	759.0	-9078.(5886.)
3000.	0.00868(0.00612)	0.00614	0.00254	-8.8(10.2)	760.8	-6706.(7760.)
3250.	0.00499(0.00237)	0.00425	0.00074	-6.3(7.7)	762.4	-4840.(5884.)
3500.	0.00386(0.00215)	0.00297	0.00089	-3.9(4.7)	763.7	-2965.(3615.)
3750.	0.00038(0.00481)	0.00231	-0.00193	-1.4(0.5)	764.9	-1084.(349.)
4000.	0.00255(0.00164)	0.00226	0.00029	1.0(0.0)	766.0	804.(0.)
z micras A	P07exp adim B	P07fit adim C	P07exp-P07fit adim D	dP07fit/dz metros-l E	v m/s F	dP07fit/dt sec-l G
50.	0.06014(0.00420)	0.05841	0.00173	14.5(0.0)	470.1	6816.(0.)
100.	0.05658(0.00462)	0.05888	-0.00230	4.1(3.8)	523.2	2126.(1983.)
150.	0.05492(0.00441)	0.05882	-0.00390	-6.4(15.0)	566.9	-3612.(8492.)
200.	0.06287(0.00383)	0.05824	0.00463	-16.8(28.4)	599.3	-10074.(16996.)
250.	0.05790(0.00198)	0.05714	0.00076	-27.2(22.9)	620.3	-16897.(14223.)
300.	0.05668(0.00049)	0.05480	0.00188	-34.0(20.5)	637.2	-21690.(13050.)
400.	0.04858(0.00406)	0.04942	-0.00084	-51.3(10.1)	662.7	-34003.(6700.)
500.	0.04302(0.00102)	0.04243	0.00059	-61.5(6.7)	680.8	-41849.(4572.)
600.	0.03568(0.00317)	0.03643	-0.00075	-56.8(16.7)	694.1	-39418.(11571.)
700.	0.03131(0.00140)	0.03077	0.00054	-53.1(16.1)	704.3	-37363.(11318.)
800.	0.02543(0.00060)	0.02574	-0.00031	-47.1(10.8)	712.3	-33556.(7686.)
900.	0.02130(0.00073)	0.02147	-0.00017	-42.0(1.9)	718.8	-30218.(1342.)
1000.	0.01755(0.00167)	0.01808	-0.00053	-35.4(1.9)	724.2	-25608.(1354.)
1250.	0.00980(0.00047)	0.01048	-0.00068	-25.4(1.5)	734.3	-18681.(1099.)
1500.	0.00633(0.00146)	0.00536	0.00097	-15.5(3.4)	741.5	-11508.(2511.)
1750.	0.00373(0.00220)	0.00272	0.00101	-5.6(3.5)	746.8	-4180.(2628.)

2000.	0.00170 (0.00212)	0.00256	-0.00086	4.3 (0.0)	750.9	3247. (0.)
z micras A	P08exp adim B	P08fit adim C	P08exp-P08fit adim D	dP08fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP08fit/dt sec-1 G
50.	0.10438 (0.00340)	0.10468	-0.00030	-88.2 (0.0)	470.1	-41444. (0.)
100.	0.10077 (0.00553)	0.10013	0.00064	-93.9 (11.0)	523.2	-49118. (5766.)
150.	0.09148 (0.00130)	0.09530	-0.00382	-99.6 (17.6)	566.9	-56463. (9989.)
200.	0.09276 (0.00206)	0.09017	0.00259	-105.3 (31.2)	599.3	-63106. (18710.)
250.	0.08763 (0.00059)	0.08476	0.00287	-111.0 (27.0)	620.3	-68853. (16754.)
300.	0.07959 (0.00079)	0.07801	0.00158	-118.4 (19.6)	637.2	-75444. (12515.)
400.	0.06462 (0.00534)	0.06513	-0.00051	-119.4 (9.3)	662.7	-79126. (6166.)
500.	0.05154 (0.00325)	0.05182	-0.00028	-116.9 (13.1)	680.8	-79586. (8884.)
600.	0.04049 (0.00090)	0.04076	-0.00027	-102.0 (22.3)	694.1	-70798. (15444.)
700.	0.03174 (0.00272)	0.03196	-0.00022	-86.0 (17.3)	704.3	-60549. (12156.)
800.	0.02393 (0.00025)	0.02495	-0.00102	-70.7 (11.2)	712.3	-50388. (8006.)
900.	0.01912 (0.00066)	0.01997	-0.00085	-56.0 (5.2)	718.8	-40238. (3709.)
1000.	0.01379 (0.00077)	0.01578	-0.00199	-43.3 (6.6)	724.2	-31387. (4810.)
1250.	0.00750 (0.00160)	0.00688	0.00062	-27.9 (13.6)	734.3	-20458. (9986.)
1500.	0.00477 (0.00065)	0.00185	0.00292	-12.4 (14.3)	741.5	-9172. (10626.)
1750.	0.00075 (0.00209)	0.00070	0.00005	3.1 (6.5)	746.8	2321. (4866.)
2000.	0.00229 (0.00206)	0.00341	-0.00112	18.6 (0.0)	750.9	13959. (0.)
z micras A	P09exp adim B	P09fit adim C	P09exp-P09fit adim D	dP09fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP09fit/dt sec-1 G
50.	0.05477 (0.00395)	0.05605	-0.00128	-129.0 (0.0)	470.1	-60643. (0.)
100.	0.05008 (0.00327)	0.04981	0.00027	-120.4 (4.1)	523.2	-62993. (2156.)
150.	0.04735 (0.00367)	0.04401	0.00334	-111.7 (3.5)	566.9	-63323. (1985.)
200.	0.03757 (0.00141)	0.03864	-0.00107	-103.0 (9.0)	599.3	-61728. (5394.)
250.	0.03176 (0.00124)	0.03371	-0.00195	-94.4 (9.8)	620.3	-58525. (6073.)
300.	0.02966 (0.00163)	0.02904	0.00062	-89.0 (8.1)	637.2	-56685. (5135.)
400.	0.02207 (0.00093)	0.02157	0.00050	-71.2 (4.5)	662.7	-47191. (2974.)
500.	0.01490 (0.00065)	0.01616	-0.00126	-52.7 (1.9)	680.8	-35871. (1309.)
600.	0.01164 (0.00182)	0.01154	0.00010	-41.0 (6.0)	694.1	-28472. (4192.)
700.	0.00904 (0.00382)	0.00797	0.00107	-30.4 (10.4)	704.3	-21425. (7318.)
800.	0.00519 (0.00107)	0.00546	-0.00027	-19.8 (7.8)	712.3	-14111. (5560.)
900.	0.00365 (0.00051)	0.00401	-0.00036	-9.2 (0.5)	718.8	-6617. (361.)
1000.	0.00376 (0.00034)	0.00362	0.00014	1.4 (0.0)	724.2	1015. (0.)
z micras A	P10exp adim B	P10fit adim C	P10exp-P10fit adim D	dP10fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP10fit/dt sec-1 G
50.	0.08196 (0.00285)	0.08111	0.00085	-227.5 (0.0)	470.1	-106948. (0.)
100.	0.06899 (0.00248)	0.07018	-0.00119	-209.9 (3.4)	523.2	-109820. (1775.)
150.	0.06179 (0.00344)	0.06012	0.00167	-192.3 (6.5)	566.9	-109015. (3692.)
200.	0.04949 (0.00329)	0.05095	-0.00146	-174.7 (15.5)	599.3	-104698. (9307.)
250.	0.04056 (0.00131)	0.04265	-0.00209	-157.1 (17.5)	620.3	-97449. (10874.)
300.	0.03729 (0.00279)	0.03541	0.00188	-137.3 (13.2)	637.2	-87488. (8430.)
400.	0.02308 (0.00490)	0.02383	-0.00075	-106.1 (6.2)	662.7	-70312. (4103.)
500.	0.01508 (0.00170)	0.01575	-0.00067	-76.5 (3.8)	680.8	-52074. (2604.)
600.	0.00864 (0.00191)	0.00978	-0.00114	-55.9 (11.0)	694.1	-38786. (7607.)
700.	0.00685 (0.00212)	0.00514	0.00171	-37.0 (15.6)	704.3	-26045. (11015.)
800.	0.00352 (0.00075)	0.00239	0.00113	-18.1 (14.5)	712.3	-12871. (10364.)
900.	0.00201 (0.00009)	0.00153	0.00048	0.8 (6.1)	718.8	605. (4398.)
1000.	0.00141 (0.00058)	0.00256	-0.00115	19.8 (0.0)	724.2	14303. (0.)
z micras A	P11exp adim B	P11fit adim C	P11exp-P11fit adim D	dP11fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP11fit/dt sec-1 G
50.	0.02694 (0.00193)	0.02821	-0.00127	-86.0 (0.0)	470.1	-40405. (0.)
100.	0.02536 (0.00421)	0.02409	0.00127	-79.0 (3.3)	523.2	-41328. (1709.)
150.	0.02161 (0.00206)	0.02032	0.00129	-72.0 (2.8)	566.9	-40834. (1615.)
200.	0.01575 (0.00282)	0.01689	-0.00114	-65.1 (2.4)	599.3	-38990. (1457.)
250.	0.01408 (0.00049)	0.01381	0.00027	-58.1 (2.0)	620.3	-36039. (1250.)
300.	0.01050 (0.00108)	0.01100	-0.00050	-54.3 (1.6)	637.2	-34625. (1019.)
400.	0.00690 (0.00117)	0.00634	0.00056	-38.8 (0.8)	662.7	-25680. (507.)
500.	0.00332 (0.00164)	0.00325	0.00007	-23.2 (0.1)	680.8	-15767. (46.)
600.	0.00223 (0.00073)	0.00171	0.00052	-7.6 (0.9)	694.1	-5259. (626.)
700.	0.00128 (0.00207)	0.00173	-0.00045	8.0 (0.0)	704.3	5644. (0.)
z micras A	P12exp adim B	P12fit adim C	P12exp-P12fit adim D	dP12fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP12fit/dt sec-1 G
50.	0.04353 (0.00289)	0.04236	0.00117	-173.4 (0.0)	470.1	-81515. (0.)
100.	0.03290 (0.00207)	0.03415	-0.00125	-155.1 (0.0)	523.2	-81148. (0.)
150.	0.02855 (0.00074)	0.02685	0.00170	-136.8 (0.0)	566.9	-77552. (0.)
200.	0.01778 (0.00136)	0.02047	-0.00269	-118.4 (0.0)	599.3	-70957. (0.)
250.	0.01470 (0.00081)	0.01501	-0.00031	-100.1 (0.0)	620.3	-62092. (0.)
300.	0.01133 (0.00079)	0.01046	0.00087	-81.8 (0.0)	637.2	-52104. (0.)
400.	0.00366 (0.00180)	0.00412	-0.00046	-45.1 (0.0)	662.7	-29894. (0.)

Sección D.2

Expansión de 1000 mbar

500.	0.00378(0.00067)	0.00144	0.00234	-8.4(0.0)	680.8	-5746.(0.)
600.	0.00107(0.00240)	0.00243	-0.00136	28.2(0.0)	694.1	19594.(0.)
z micras A	P13exp adim B	P13fit adim C	P13exp-P13fit adim D	dP13fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP13fit/dt sec-1 G
50.	0.01470(0.00152)	0.01412	0.00058	-63.4(0.0)	470.1	-29790.(0.)
100.	0.01025(0.00169)	0.01112	-0.00087	-56.5(0.0)	523.2	-29550.(0.)
150.	0.00838(0.00095)	0.00847	-0.00009	-49.6(0.0)	566.9	-28107.(0.)
200.	0.00619(0.00070)	0.00616	0.00003	-42.7(0.0)	599.3	-25578.(0.)
250.	0.00466(0.00037)	0.00420	0.00046	-35.8(0.0)	620.3	-22201.(0.)
300.	0.00261(0.00135)	0.00258	0.00003	-28.9(0.0)	637.2	-18409.(0.)
400.	0.00024(0.00199)	0.00038	-0.00014	-15.1(0.0)	662.7	-10007.(0.)
z micras A	P14exp adim B	P14fit adim C	P14exp-P14fit adim D	dP14fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP14fit/dt sec-1 G
50.	0.01718(0.00261)	0.01784	-0.00066	-37.5(0.0)	470.1	-17624.(0.)
100.	0.01704(0.00570)	0.01558	0.00146	-52.8(31.9)	523.2	-27599.(16695.)
150.	0.01213(0.00236)	0.01256	-0.00043	-68.0(12.4)	566.9	-38555.(7030.)
200.	0.00790(0.00161)	0.00787	0.00003	-69.1(7.1)	599.3	-41394.(4256.)
250.	0.00475(0.00135)	0.00501	-0.00026	-45.3(26.6)	620.3	-28118.(16506.)
300.	0.00346(0.00231)	0.00334	0.00012	-21.6(0.0)	637.2	-13751.(0.)
z micras A	P15exp adim B	P15fit adim C	P15exp-P15fit adim D	dP15fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP15fit/dt sec-1 G
50.	0.00579(0.00134)	0.00639	-0.00060	-47.3(0.0)	470.1	-22212.(0.)
100.	0.00562(0.00209)	0.00424	0.00138	-39.0(0.0)	523.2	-20394.(0.)
150.	0.00196(0.00516)	0.00249	-0.00053	-30.7(0.0)	566.9	-17409.(0.)
200.	0.00049(0.00184)	0.00117	-0.00068	-22.4(0.0)	599.3	-13448.(0.)
250.	0.00068(0.00073)	0.00025	0.00043	-14.2(0.0)	620.3	-8790.(0.)
z micras A	P16exp adim B	P16fit adim C	P16exp-P16fit adim D	dP16fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP16fit/dt sec-1 G
50.	0.00373(0.00315)	0.00318	0.00055	-12.3(0.0)	470.1	-5792.(0.)
100.	0.00106(0.00175)	0.00260	-0.00154	-10.8(0.0)	523.2	-5624.(0.)
150.	0.00341(0.00324)	0.00210	0.00131	-9.2(0.0)	566.9	-5197.(0.)
200.	0.00149(0.00176)	0.00168	-0.00019	-7.6(0.0)	599.3	-4548.(0.)
250.	0.00122(0.00103)	0.00134	-0.00012	-6.0(0.0)	620.3	-3728.(0.)

A: Posición de la tobera. z=0 no corresponde con el punto donde M=1.
 B: Población obtenida a partir de las intensidades medidas en el laboratorio.
 C: Ajuste puntual de la población.
 D: Diferencia entre la población experimental y la ajustada.
 E: Derivada en z de la población ajustada con su error.
 F: Velocidad de expansión.
 G: Derivada temporal de la población ($dP/dt=v \cdot dP/dz$).

z micras H	nexp 10 ²² m-3 I	nfit 10 ²² m-3 J	nexp-nfit 10 ²² m-3 K	Ttpoint Kelvin L	Ttsmo Kelvin M	Trpoint Kelvin N	Trfit Kelvin O
50.	631.0920	708.7666	-77.6746	190.230	208.020(11.0)	148.990	146.320(3.1)
100.	471.3689	511.6420	-40.2731	170.320	177.220(9.2)	131.350	134.330(4.0)
150.	342.3990	364.6001	-22.2011	148.960	149.450(7.6)	116.650	123.600(1.9)
200.	260.2623	265.9650	-5.7027	121.750	127.810(6.7)	120.000	114.010(1.8)
300.	152.7937	164.2558	-11.4621	97.020	102.720(2.5)	99.040	97.730(0.5)
400.	99.4601	108.2452	-8.7851	82.000	85.610(3.3)	82.970	84.650(0.9)
500.	68.5366	75.3810	-6.8444	69.670	73.490(1.5)	73.000	74.100(0.4)
600.	51.6107	54.9354	-3.3247	62.530	64.580(1.1)	64.650	65.570(0.4)
700.	41.5452	39.4306	2.1146	57.750	55.860(1.1)	58.630	58.510(0.0)
800.	31.5167	32.3836	-0.8669	51.680	52.350(0.8)	52.550	52.960(0.2)
900.	25.2500	25.8795	-0.6295	46.940	47.940(0.7)	48.630	48.290(0.2)
1000.	20.8260	21.1156	-0.2896	43.630	44.250(0.9)	44.770	44.430(0.2)
1250.	13.5369	13.6312	-0.0943	36.640	37.130(0.8)	37.810	37.310(0.3)
1500.	9.5421	9.4879	0.0542	31.260	31.940(0.7)	33.810	32.550(0.4)
1750.	7.0114	6.9699	0.0415	29.590	27.970(1.3)	26.980	29.180(0.8)
2000.	5.3643	5.3306	0.0337	24.160	24.860(1.6)	27.980	26.640(1.2)
2250.	4.2346	4.2060	0.0286	22.670	22.360(0.6)	24.290	24.640(0.2)
2500.	3.5215	3.4020	0.1195	21.060	20.330(0.5)	22.560	22.990(0.2)
2750.	2.8210	2.8077	0.0133	18.630	18.650(0.5)	21.740	21.590(0.3)
3000.	2.3666	2.3562	0.0104	16.990	17.250(0.7)	20.930	20.370(0.6)
3250.	2.0510	2.0053	0.0457	16.290	16.060(0.4)	19.320	19.300(0.1)
3500.	1.7418	1.7273	0.0145	15.140	15.030(0.3)	18.310	18.350(0.2)
3750.	1.5146	1.5032	0.0114	16.340	14.140(0.9)	14.210	17.510(0.9)
4000.	1.2937	1.3201	-0.0264	13.170	13.360(0.6)	16.780	16.750(0.4)
4250.	1.1675	1.1685	-0.0010	12.670	12.660(0.4)	16.040	16.060(0.0)
4500.	1.0792	1.0416	0.0376	12.360	12.040(0.3)	15.380	15.450(0.1)
4750.	0.9088	0.9343	-0.0255	11.160	11.470(0.3)	15.100	14.890(0.1)
5000.	0.8330	0.8427	-0.0097	11.610	10.960(0.9)	13.040	14.400(0.6)

5500.	0.6879	0.6959	-0.0080	9.520	10.040 (0.4)	14.520	13.540 (0.4)
6000.	0.5888	0.5843	0.0045	9.540	9.260 (0.4)	12.370	12.850 (0.2)
6500.	0.4964	0.4976	-0.0012	8.490	8.570 (0.2)	12.430	12.280 (0.1)
7000.	0.4335	0.4288	0.0047	7.880	7.960 (0.3)	12.130	11.820 (0.1)
7500.	0.3708	0.3734	-0.0026	7.490	7.420 (0.2)	11.200	11.450 (0.1)
8000.	0.3263	0.3281	-0.0018	6.660	6.930 (0.4)	11.760	11.150 (0.2)
8500.	0.2960	0.2906	0.0054	6.590	6.480 (0.5)	10.840	10.900 (0.0)
9000.	0.2468	0.2591	-0.0123	5.720	6.080 (0.4)	11.170	10.700 (0.4)
9500.	0.2395	0.2325	0.0070	5.810	5.720 (0.4)	10.600	10.540 (0.1)
10000.	0.2119	0.2098	0.0021	5.400	5.380 (0.6)	10.460	10.400 (0.2)
10500.	0.1906	0.1903	0.0003	4.930	5.080 (0.5)	10.780	10.300 (0.4)
11000.	0.1846	0.1734	0.0112	4.950	4.800 (0.4)	10.390	10.210 (0.1)
11500.	0.1556	0.1586	-0.0030	4.400	4.550 (0.4)	10.430	10.140 (0.4)
12000.	0.1512	0.1457	0.0055	4.330	4.310 (0.3)	10.390	10.080 (0.3)
12500.	0.1306	0.1342	-0.0036	3.980	4.100 (0.6)	10.190	10.030 (1.1)
13000.	0.1185	0.1241	-0.0056	3.850	3.900 (0.4)	9.710	9.990 (0.4)
13500.	0.1196	0.1151	0.0045	3.930	3.710 (0.6)	9.500	9.960 (0.5)
14000.	0.1126	0.1070	0.0056	3.510	3.540 (0.5)	10.600	9.940 (0.7)
14500.	0.0971	0.0998	-0.0027	3.750	3.390 (0.4)	8.270	9.920 (0.3)
15000.	0.1002	0.0932	0.0070	3.160	3.240 (0.4)	11.050	9.900 (0.6)
15500.	0.0890	0.0873	0.0017	2.910	3.100 (0.5)	11.100	9.890 (1.0)
16000.	0.0805	0.0819	-0.0014	2.700	2.980 (0.7)	11.220	9.870 (2.4)
16500.	0.0779	0.0770	0.0009	2.640	2.860 (0.6)	11.230	9.870 (1.1)
17000.	0.0685	0.0726	-0.0041	1.840	2.750 (0.9)	17.030	9.860 (3.6)
17500.	0.0706	0.0685	0.0021	2.380	2.650 (0.7)	11.920	9.850 (2.0)
18000.	0.0633	0.0647	-0.0014	2.180	2.550 (0.6)	12.190	9.850 (1.3)
18500.	0.0639	0.0613	0.0026	2.030	2.460 (0.8)	13.650	9.840 (2.2)
19000.	0.0658	0.0581	0.0077	1.700	2.370 (0.7)	18.360	9.840 (2.8)
19500.	0.0515	0.0552	-0.0037	1.660	2.290 (0.0)	14.950	9.840 (0.0)

H: Posición de la tobera. z=0 no corresponde con el punto donde M=1.
 I: Densidad obtenida a partir de las intensidades de la banda Q ro-vibracional del n2.
 J: Ajuste de la densidad experimental.
 K: Diferencia entre la densidad experimental y la ajustada.
 L: Temperatura traslacional calculada a partir de los puntos experimentales de densidad y temperatura rotacional.
 M: Temperatura traslacional calculada a partir de los ajustes de los puntos experimentales de densidad y temperatura rotacional.
 N: Temperatura rotacional experimental.
 O: Ajuste de la temperatura rotacional.

 * CUADERNO DE LABORATORIO *

POBLACIONES

Preparación del experimento

- 1) Pongo el cero del baratrón y el sensotec.
- 2) Enfoco la óptica a 60 cm-1 en estático con una presión de cámara de unos 50 mbar de N2.
- 3) Utilizo la Rayleigh para colocar la lámina de semionda. No toco el enfoque del sistema de colección. Lo más adecuado es utilizar la banda Q de la transición vibracional 2-1, pero los resultados con la Rayleigh son también buenos. La posición óptima es 132.4°
- 4) Centro la tobera en el eje de expansión con una rendija del monocromador de 50umx1mm y con un agrupamiento de 1x400. La tobera se ha ido -10.51 um desde el experimento anterior.
- 5) Coloco la pantalla en las condiciones anteriores.
- 6) No centro la tobera en el eje de colección a 2330 cm-1 porque prácticamente en ningún experimento hecho hasta ahora he conseguido ajustar la tobera y, en los casos en los que lo he conseguido, la variación ha sido muy pequeña.
- 7) Medidas:

Condiciones experimentales:
 - P(atmosférica, Rocasolano)=944.75(0.05) mbar
 - P0(precámara, Sensotec)=55.20(0.05) mbar
 - T(ambiente)=24.0(0.5) °C=297.0(0.5) K
 - P(cámara, Baratrón 1 bar)=0.090(0.005) mbar
 - Potencia del láser (2045)=5.8 W@514.5 nm
 - S2=7 mmx15 mm

z (um)	Archivos	Comentarios
50	00-02 00poblaciones.crg	Con pantalla, 50umx1mm, 5x20, T=10s, 2 fotos
100	03-06	
150	00-02 01poblaciones.crg	Con pantalla hasta 150um (incluido),
200	03-05	50umx1mm, 5x40, T=10s, 2 fotos
250	00-02 02poblaciones.crg	Sin pantalla, 50umx1mm, 5x74, T=10s, 2 fotos
300	03-05	
400	06-08	
500	00-02 03poblaciones.crg	Sin pantalla, 50umx2mm, 5x148, T=10s, 2 fotos

600	03-06		
700	07-10		
800	00-02	04poblaciones.crg	Sin pantalla, 100umx5mm, 5x250, T=10s, 2 fotos
900	03-05		
1000	06-09		
1250	00-02	05poblaciones.crg	Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=10s, 1 foto
1500	03-05		
1750	06-09		
2000	10-13		
2250	14-17		
2500	18-21		
2750	22-26		
3000	27-30		
3250	00-02	06poblaciones.crg	Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=30s, 1 foto
3500	03-06		
3750	07-10		
4000	11-15		
4250	16-20		
4500	21-25		
4750	26-30		
5000	00-02	07poblaciones.crg	Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=60s, 1 foto
5500	03-05		
6000	06-08		
6500	09-11		
7000	12-15		
7500	16-19		
8000	20-23		
8500	24-27		
9000	28-31		
9500	32-35		
10000	36-40		
10500	41-46		
11000	47-51		
11500	52-56		
12000	57-61		
12500	62-66		
13000	67-72		
13500	73-78		
14000	79-84		
14500	85-90		
15000	91-96		
15500	97-102		
16000	103-109		
16500	110-115		
17000	116-122		
17500	123-129		
18000	130-136		
18500	137-143		
19000	144-150		
19500	151-158		

Última posición de la tobera: -19500 um (no lo apunté).

ENSIDADES ABSOLUTAS

Consideraciones iniciales

Debido a que la señal nos permite llegar relativamente bien hasta 11mm, mediremos para 300, 900, 3000, 6000, 9000, 12000, 15000 y 18000 um sin utilizar la pantalla en ningún caso.

Preparación del experimento

- 1) Pongo el cero del baratrón y el sensotec.
- 2) Enfoco la óptica a 2330 cm⁻¹ en estático con una presión de cámara de unos 50 mbar de N₂.
- 3) Centro la tobera en el eje de expansión con una rendija del monocromador de 50umx1mm y agrupamiento 1x77. La tobera se ha ido -17.02 um desde el experimento anterior.
- 4) Coloco la pantalla sólo para 300 um.
- 5) Centro la tobera en el eje de colección a 2330 cm⁻¹ utilizando una rendija para el monocromador de 50umx1mm, con un agrupamiento de 5x74 y con la tobera a una distancia de 50um. La muevo -4.5um y parece que mejora algo pero muy levemente.
- 6) Utilizo la banda Q rovibracional para colocar el eje de la lámina de semionda. La posición óptima es 85.9°.
- 7) Medidas:

Condiciones experimentales:

- P(atmosférica, Rocasolano) [05/12/05]=936.35(0.10) mbar
[07/12/05]=945.25(0.05) mbar
- T(ambiente) [05/12/05]=-----(---)K (no apunté el valor)

[07/12/05]=23.0(0.5)°C=296.0(0.5) K
 - Potencia del láser (2045)=5.8W@514.5nm
 - S2=7mmx15mm

Comentarios: Las presiones en precámara que se dan a continuación son presiones medidas con el Sensotec. En estos casos no es necesario dar una presión inicial y otra final porque el flujo de gas es bastante estable. Las presiones de cámara están medidas con el baratrón de Ibar.

[05/12/05]

z=300um

////////

S=50umx1mm, Agrup.=5x40, T=10s, Con pantalla
 Archivos=0#expansion300.crg, 0#estatico300.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	67.00(0.05)	00-04	152.75(0.05)	00-04
2	67.00(0.05)	00-04	152.20(0.05)	00-04
3	67.00(0.05)	00-04	155.25(0.05)	00-04

z=900um

////////

S=100umx5mm, Agrup.=5x370, T=10s, Sin pantalla
 Archivos=0#expansion900.crg, 0#estatico900.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	66.00(0.05)	00-04	42.10(0.05)	00-04
2	67.00(0.05)	00-04	43.40(0.05)	00-04
3	66.00(0.05)	00-04	43.11(0.01)	00-04

z=3000um

////////

S=150umx5mm, Agrup.=5x370, T=30s
 Archivos=0#expansion3000.crg, 0#estatico3000.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	60.00(0.05)	00-04	5.42(0.01)	00-04
2	66.00(0.05)	00-04	5.46(0.01)	00-04
3	66.00(0.05)	00-04	5.40(0.01)	00-04

z=6000um

////////

S=150umx5mm, Agrup.=5x370, T=60s
 Archivos=0#expansion6000.crg, 0#estatico6000.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	65.00(0.05)	00-04	1.54(0.01)	00-04
2	65.00(0.05)	00-04	1.55(0.01)	00-04
3	65.00(0.05)	00-04	----(----)*	00-04

[07/05/05]

z=9000um

////////

S=150umx5mm, Agrup.=5x370, T=60s
 Archivos=0#expansion9000.crg, 0#estatico9000.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	56.00(0.05)	00-04	1.01(0.01)	00-04
2	56.00(0.05)	00-04	1.00(0.01)	00-04
3	56.00(0.05)	00-04	1.00(0.01)	00-04

z=12000um

////////

S=150umx5mm, Agrup.=5x370, T=60s
 Archivos=0#expansion12000.crg, 0#estatico12000.crg

#	Expansión		Estático	
	P0 (mbar)	Archivos	P_camara (mbar)	Archivos
1	56.00(0.05)	00-04	0.59(0.01)	00-04
2	56.00(0.05)	00-04	0.50(0.01)	00-04
3	56.00(0.05)	00-04	0.50(0.01)	00-04

z=15000um

```

////////
S=150umx5mm, Agrup.=5x370, T=60s
Archivos=0#expansion15000.crg, 0#estatico15000.crg

      Expansión                      Estático
#      P0(mbar)      Archivos      P_camara(mbar)      Archivos
1      56.00(0.05)      00-04      0.49(0.01)      00-04
2      56.00(0.05)      00-04      0.54(0.01)      00-04
3      56.00(0.05)      00-04      0.57(0.01)      00-04

z=18000um
////////
S=150umx5mm, Agrup.=5x370, T=60s
Archivos=0#expansion18000.crg, 0#estatico18000.crg

      Expansión                      Estático
#      P0(mbar)      Archivos      P_camara(mbar)      Archivos
1      56.00(0.05)      00-04      0.47(0.01)      00-04
2      56.00(0.05)      00-04      0.56(0.01)      00-04
3      56.00(0.05)      00-04      0.58(0.01)      00-04

Última posición de la tobera: -300.01 um

(*) No he escrito el dato al que se refiere el * o no ha sido medido.

DENSIDADES RELATIVAS
-----

Consideraciones iniciales
.....

Las posiciones de tobera en las que mediremos serán las mismas que para las
poblaciones excepto en el punto 250um, que no aparece en esta serie.

Preparación del experimento
.....

1) Pongo el cero del baratrón (se ha ido unos 0.02 mbar).
2) Enfoco la óptica a 2330 cm-1 en estático con una presión de cámara de unos
50 mbar de N2 con una rendija de 150umx10mm y un agrupamiento de 3x400.
3) Utilizo la banda Q roviibracional para colocar el eje de la lámina de semionda.
La posición que maximiza la señal es 87.9°.
4) Centro la tobera en el eje de expansión con una rendija del monocromador
de 50umx1mm y agrupamiento de 3x77. La tobera se ha ido +6.07 um desde el
experimento anterior.
5) Coloco la pantalla.
6) Centro la tobera en el eje de colección a 2330 cm-1 utilizando una rendija
para el monocromador de 150umx10mm, con la pantalla con la cámara a una
presión de 50.3 mbar.
7) Medidas:

Condiciones experimentales:
- P0(precámara,Sensotec,inicial)=51.00(0.05) mbar
- T(ambiente)=23.5(0.5) °C=296.5(0.5) K
- P(cámara,Baratrón 1 bar)=0.090(0.005) mbar
- Potencia del láser (2045)=5.8 W@514.5 nm
- S2=7 mmx15 mm

z(um)      Archivos      Comentarios
50      00-09      00densidad.crg      Con pantalla, 50umx1mm, 5x20, T=10s
100      10-18
100      00-05      01densidad.crg      Con pantalla, 50umx1mm, 5x40, T=10s
150      06-10
200      11-17
200      00-03      02densidad.crg      Sin pantalla, 50umx1mm, 5x77, T=10s
300      04-07
400      08-12
400      00-03      03densidad.crg      Sin pantalla, 100umx2mm, 5x140, T=10s
500      04-07
600      08-11
600      00-03      04densidad.crg      Sin pantalla, 150umx5mm, 5x300, T=10s
700      04-07
800      08-12
900      13-17
900      00-03      05densidad.crg      Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=10s
1000      04-07
1250      08-12
1500      13-17
1750      18-23
2000      24-30
2000      00-03      06densidad.crg      Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=30s
2250      04-07
2500      08-12

```

```

2750    13-18
3000    19-24
3250    25-30
3500    31-36
3750    37-48
4000    49-54
4250    55-60
4500    61-66
4750    67-72
5000    73-78
5000    00-03 07densidad.crg      Sin pantalla, 150umx5mm, 5x370, T=60s
5500    04-08
6000    09-13
6500    14-18
7000    19-24
7500    25-30
8000    31-36
8500    37-42
9000    43-48
9500    49-54
10000   55-61
10500   62-68
11000   69-74
11500   75-81
12000   82-88
12500   89-95
13000   96-103
13500   104-110
14000   111-117
14500   118-124
15000   125-131
15500   132-138
16000   139-145
16500   146-152
17000   153-159
17500   160-166
18000   167-174
18500   175-181
19000   182-188
19500   189-199

```

Última posición de la tobera: -19500.16 um

D.3. Expansión de 500 mbar

FECHAS DE LOS EXPERIMENTOS:

- 24/10/05: Poblaciones
- 21/10/05: Densidades absolutas
- 20/10/05: Densidades relativas

DATOS REFERENTES A LOS EXPERIMENTOS:

Diámetro de tobera: 313 um
 Presión en precámara medido con el baratrón (1bar):

- Poblaciones: 500.55(0.05) mbar
- Densidades absolutas: 499.25-501.15 mbar
- Densidades relativas: 501.55(0.05) mbar

Temperatura de precámara:

- Poblaciones: 295.5(0.5) K
- Densidades absolutas: 295.0(0.5) K
- Densidades relativas: 295.5(0.5) K

Potencia de láser: 5.8W@514.5nm

Ángulo de la lámina de semionda:

- Poblaciones: 133.4°
- Densidades absolutas: 87.8°
- Densidades relativas: 87.3°

CONDICIONES EXPERIMENTALES:

- Poblaciones:

50-350um	-> S=50umx1mm,	Agrup=5x40,	T=10s,	Con pantalla
450-650um	-> S=50umx1mm,	Agrup=5x74,	T=10s,	Sin pantalla
750-750um	-> S=50umx1mm,	Agrup=5x74,	T=10s,	Sin pantalla
1000-1750um	-> S=100umx5mm,	Agrup=5x350,	T=30s	
2000-3000um	-> S=150umx10mm,	Agrup=5x400,	T=30s	
3500-11000um	-> S=150umx10mm,	Agrup=5x400,	T=60s	

(S es la rendija de entrada al monocromador)
 - Densidades absolutas: Medidas hechas a 300, 900, 3000, 6000 y 9000um.
 - Densidades relativas:
 50-350um -> S=50umx1mm, Agrup=5x40, T=10s, Con pantalla
 350-650um -> S=50umx1mm, Agrup=8x74, T=10s, Sin pantalla
 650-1750um -> S=100umx5mm, Agrup=8x350, T=30s
 1750-3000um -> S=150umx10mm, Agrup=5x400, T=30s
 3000-7500um -> S=150umx10mm, Agrup=5x400, T=60s
 7500-11000um -> S=150umx10mm, Agrup=5x400, T=60s

z micras A	P00exp adim B	P00fit adim C	P00exp-P00fit adim D	dP00fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP00fit/dt sec-1 G
50.	0.02629(0.00212)	0.02661	-0.00032	70.7(0.0)	511.4	36161.(0.)
100.	0.02904(0.00017)	0.03010	-0.00106	69.1(3.1)	552.8	38210.(1689.)
150.	0.03353(0.00122)	0.03352	0.00001	67.5(5.0)	583.5	39410.(2908.)
250.	0.04278(0.00248)	0.04011	0.00267	64.4(4.8)	626.4	40321.(3031.)
350.	0.04766(0.00739)	0.04639	0.00127	61.2(3.3)	654.5	40062.(2181.)
450.	0.04966(0.00293)	0.05197	-0.00231	58.9(2.7)	674.0	39719.(1820.)
550.	0.05735(0.00483)	0.05765	-0.00030	56.2(2.5)	688.3	38648.(1753.)
650.	0.06339(0.00279)	0.06326	0.00013	54.1(3.0)	699.2	37813.(2126.)
750.	0.06907(0.00012)	0.06905	0.00002	55.9(2.7)	707.7	39589.(1925.)
1000.	0.08296(0.00045)	0.08291	0.00005	54.5(1.5)	722.8	39378.(1060.)
1250.	0.09589(0.00063)	0.09568	0.00021	50.4(1.6)	732.7	36921.(1145.)
1500.	0.10807(0.00042)	0.10779	0.00028	47.5(2.0)	739.7	35128.(1507.)
1750.	0.11895(0.00107)	0.11924	-0.00029	44.8(1.7)	744.9	33357.(1254.)
2000.	0.13011(0.00126)	0.13000	0.00011	42.1(1.8)	748.9	31506.(1314.)
2500.	0.14981(0.00303)	0.14981	0.00000	37.2(1.5)	754.7	28097.(1161.)
3000.	0.16723(0.00193)	0.16664	0.00059	32.9(1.5)	758.7	24984.(1130.)
3500.	0.18233(0.00258)	0.18152	0.00081	29.5(1.2)	761.6	22498.(907.)
4000.	0.19512(0.00103)	0.19548	-0.00036	25.9(1.5)	763.9	19800.(1115.)
4500.	0.20538(0.00478)	0.20708	-0.00170	23.1(1.7)	765.7	17703.(1338.)
5000.	0.21824(0.00447)	0.21764	0.00060	20.6(1.6)	767.2	15827.(1203.)
5500.	0.22946(0.00332)	0.22765	0.00181	17.9(1.1)	768.4	13724.(820.)
6000.	0.23351(0.00139)	0.23580	-0.00229	15.9(1.2)	769.4	12241.(889.)
6500.	0.24415(0.00517)	0.24301	0.00114	14.0(0.7)	770.3	10815.(513.)
7000.	0.25038(0.00635)	0.24890	0.00148	12.1(1.1)	771.0	9314.(842.)
7500.	0.25166(0.01202)	0.25451	-0.00285	10.3(1.3)	771.7	7925.(969.)
8000.	0.26002(0.00785)	0.25953	0.00049	9.2(1.1)	772.2	7083.(817.)
8500.	0.26406(0.00678)	0.26366	0.00040	6.9(0.7)	772.7	5317.(531.)
9000.	0.26778(0.00543)	0.26736	0.00042	4.8(0.9)	773.1	3688.(675.)
9500.	0.26840(0.00995)	0.26913	-0.00073	2.3(1.1)	773.5	1799.(885.)
10000.	0.27232(0.00680)	0.26968	0.00264	-0.1(1.5)	773.8	-93.(1172.)
10500.	0.26899(0.00891)	0.26901	-0.00002	-2.6(1.4)	774.1	-1986.(1059.)
11000.	0.26593(0.01072)	0.26712	-0.00119	-5.0(0.0)	774.4	-3881.(0.)

z micras A	P01exp adim B	P01fit adim C	P01exp-P01fit adim D	dP01fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP01fit/dt sec-1 G
50.	0.03808(0.00177)	0.03712	0.00096	88.7(0.0)	511.4	45382.(0.)
100.	0.04072(0.00155)	0.04154	-0.00082	87.9(3.1)	552.8	48580.(1688.)
150.	0.04326(0.00521)	0.04591	-0.00265	87.0(3.0)	583.5	50776.(1763.)
250.	0.05652(0.00255)	0.05452	0.00200	85.3(3.0)	626.4	53432.(1860.)
350.	0.06800(0.00458)	0.06297	0.00503	83.6(2.2)	654.5	54697.(1443.)
450.	0.06625(0.00266)	0.07154	-0.00529	82.1(3.1)	674.0	55308.(2104.)
550.	0.07824(0.00491)	0.07964	-0.00140	78.5(3.8)	688.3	54045.(2630.)
650.	0.08877(0.00601)	0.08706	0.00171	72.2(4.6)	699.2	50503.(3232.)
750.	0.09507(0.00105)	0.09416	0.00091	70.1(4.9)	707.7	49617.(3448.)
1000.	0.11144(0.00049)	0.11143	0.00001	66.1(6.3)	722.8	47784.(4527.)
1250.	0.12558(0.00073)	0.12508	0.00050	56.1(3.6)	732.7	41119.(2644.)
1500.	0.13838(0.00132)	0.13802	0.00036	50.0(3.0)	739.7	37022.(2206.)
1750.	0.15039(0.00146)	0.14963	0.00076	45.6(4.0)	744.9	33982.(2971.)
2000.	0.15911(0.00123)	0.15975	-0.00064	41.0(5.0)	748.9	30727.(3779.)
2500.	0.17960(0.00160)	0.17819	0.00141	34.6(2.7)	754.7	26082.(2030.)
3000.	0.19347(0.00272)	0.19374	-0.00027	29.1(2.7)	758.7	22055.(2083.)
3500.	0.20601(0.00137)	0.20663	-0.00062	24.4(2.8)	761.6	18553.(2161.)
4000.	0.21807(0.00406)	0.21704	0.00103	20.9(2.6)	763.9	15958.(1956.)
4500.	0.22614(0.00344)	0.22616	-0.00002	16.8(1.8)	765.7	12879.(1394.)
5000.	0.23250(0.00324)	0.23315	-0.00065	14.5(2.2)	767.2	11117.(1690.)
5500.	0.23843(0.00302)	0.23931	-0.00088	12.2(2.2)	768.4	9336.(1714.)
6000.	0.24710(0.00262)	0.24435	0.00275	10.3(1.7)	769.4	7909.(1317.)
6500.	0.24570(0.00365)	0.24984	-0.00414	7.8(1.6)	770.3	5980.(1229.)
7000.	0.25477(0.00705)	0.25262	0.00215	6.8(1.0)	771.0	5281.(740.)
7500.	0.25619(0.00654)	0.25520	0.00099	5.8(1.2)	771.7	4459.(909.)
8000.	0.25969(0.01402)	0.25847	0.00122	3.0(1.4)	772.2	2354.(1066.)
8500.	0.25317(0.00990)	0.25976	-0.00659	2.2(1.8)	772.7	1707.(1375.)
9000.	0.26390(0.00457)	0.25996	0.00394	-0.2(1.6)	773.1	-175.(1235.)
9500.	0.26420(0.00973)	0.25943	0.00477	-1.9(2.1)	773.5	-1437.(1592.)
10000.	0.25228(0.00971)	0.25810	-0.00582	-3.5(0.6)	773.8	-2700.(488.)
10500.	0.25908(0.02766)	0.25595	0.00313	-5.1(0.2)	774.1	-3963.(141.)
11000.	0.25185(0.01500)	0.25298	-0.00113	-6.8(0.0)	774.4	-5228.(0.)

z	P02exp	P02fit	P02exp-P02fit	dP02fit/dz	v	dP02fit/dt
---	--------	--------	---------------	------------	---	------------

micras A	adim B	adim C	adim D	metros-1 E	m/s F	sec-1 G
50.	0.11124 (0.00367)	0.10983	0.00141	263.5 (0.0)	511.4	134754. (0.)
100.	0.11970 (0.00236)	0.12277	-0.00307	254.2 (4.8)	552.8	140522. (2638.)
150.	0.13100 (0.00766)	0.13525	-0.00425	244.9 (10.1)	583.5	142899. (5893.)
250.	0.16565 (0.00823)	0.15880	0.00685	226.3 (15.8)	626.4	141754. (9891.)
350.	0.18633 (0.00673)	0.18050	0.00583	207.7 (11.6)	654.5	135940. (7579.)
450.	0.19568 (0.00154)	0.19951	-0.00383	193.7 (9.1)	674.0	130554. (6133.)
550.	0.21785 (0.00404)	0.21760	0.00025	176.5 (9.2)	688.3	121485. (6349.)
650.	0.22737 (0.00193)	0.23409	-0.00672	156.3 (9.6)	699.2	109285. (6738.)
750.	0.25412 (0.00133)	0.24978	0.00434	149.5 (16.3)	707.7	105801. (11543.)
1000.	0.28534 (0.00280)	0.28322	0.00212	126.0 (18.6)	722.8	91073. (13422.)
1250.	0.31173 (0.00288)	0.30870	0.00303	100.1 (17.1)	732.7	73343. (12507.)
1500.	0.33071 (0.00190)	0.32881	0.00190	81.4 (17.8)	739.7	60226. (13167.)
1750.	0.34405 (0.00175)	0.34464	-0.00059	62.5 (16.4)	744.9	46526. (12239.)
2000.	0.35927 (0.00189)	0.35566	0.00361	48.0 (15.4)	748.9	35917. (11533.)
2500.	0.37355 (0.00361)	0.37208	0.00147	29.8 (13.3)	754.7	22498. (10007.)
3000.	0.38422 (0.00369)	0.38109	0.00313	18.3 (13.0)	758.7	13861. (9886.)
3500.	0.38413 (0.00262)	0.38661	-0.00248	10.1 (11.8)	761.6	7700. (9010.)
4000.	0.38753 (0.00436)	0.38805	-0.00052	4.5 (9.4)	763.9	3404. (7172.)
4500.	0.38720 (0.00447)	0.38787	-0.00067	0.4 (7.0)	765.7	322. (5343.)
5000.	0.38842 (0.00257)	0.38623	0.00219	-2.0 (5.3)	767.2	-1549. (4049.)
5500.	0.38237 (0.00670)	0.38463	-0.00226	-3.1 (4.8)	768.4	-2411. (3659.)
6000.	0.38321 (0.00186)	0.38248	0.00073	-5.0 (2.7)	769.4	-3848. (2076.)
6500.	0.37812 (0.01008)	0.37906	-0.00094	-5.4 (2.0)	770.3	-4157. (1544.)
7000.	0.37695 (0.01233)	0.37571	0.00124	-5.6 (1.5)	771.0	-4335. (1187.)
7500.	0.37437 (0.01073)	0.37345	0.00092	-5.8 (1.5)	771.7	-4450. (1136.)
8000.	0.36644 (0.01129)	0.36996	-0.00352	-6.0 (1.5)	772.2	-4670. (1127.)
8500.	0.36878 (0.00632)	0.36767	0.00111	-6.6 (0.7)	772.7	-5106. (559.)
9000.	0.36576 (0.01410)	0.36457	0.00119	-7.8 (1.5)	773.1	-6063. (1169.)
9500.	0.35950 (0.01456)	0.36035	-0.00085	-9.0 (1.7)	773.5	-6997. (1340.)
10000.	0.35881 (0.00630)	0.35553	0.00328	-10.3 (2.4)	773.8	-7931. (1866.)
10500.	0.34977 (0.01847)	0.35010	-0.00033	-11.5 (1.0)	774.1	-8871. (786.)
11000.	0.34272 (0.00759)	0.34407	-0.00135	-12.7 (0.0)	774.4	-9804. (0.)
z micras A	P03exp adim B	P03fit adim C	P03exp-P03fit adim D	dP03fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP03fit/dt sec-1 G
50.	0.06961 (0.00127)	0.06812	0.00149	140.9 (0.0)	511.4	72056. (0.)
100.	0.07236 (0.00488)	0.07498	-0.00262	133.5 (1.5)	552.8	73799. (847.)
150.	0.08127 (0.00363)	0.08147	-0.00020	126.1 (6.7)	583.5	73579. (3929.)
250.	0.09368 (0.00395)	0.09334	0.00034	111.3 (11.3)	626.4	69718. (7103.)
350.	0.10658 (0.00755)	0.10373	0.00285	96.5 (16.0)	654.5	63146. (10439.)
450.	0.11263 (0.00086)	0.11266	-0.00003	83.5 (16.8)	674.0	56266. (11323.)
550.	0.11814 (0.00309)	0.11941	-0.00127	67.8 (16.5)	688.3	46646. (11378.)
650.	0.12458 (0.00743)	0.12468	-0.00010	53.6 (15.0)	699.2	37505. (10509.)
750.	0.13197 (0.00306)	0.12821	0.00376	39.9 (12.6)	707.7	28251. (8938.)
1000.	0.13600 (0.00285)	0.13509	0.00091	24.0 (12.2)	722.8	17340. (8796.)
1250.	0.13907 (0.00278)	0.13800	0.00107	12.2 (12.9)	732.7	8946. (9474.)
1500.	0.13826 (0.00187)	0.13873	-0.00047	3.8 (12.3)	739.7	2789. (9069.)
1750.	0.13897 (0.00182)	0.13802	0.00095	-2.5 (9.6)	744.9	-1889. (7140.)
2000.	0.13734 (0.00101)	0.13551	0.00183	-7.1 (7.6)	748.9	-5282. (5703.)
2500.	0.13013 (0.00213)	0.12943	0.00070	-11.8 (6.1)	754.7	-8890. (4637.)
3000.	0.12280 (0.00379)	0.12182	0.00098	-13.6 (5.4)	758.7	-10333. (4060.)
3500.	0.11263 (0.00214)	0.11374	-0.00111	-13.9 (5.1)	761.6	-10556. (3912.)
4000.	0.10654 (0.00198)	0.10686	-0.00032	-13.5 (3.9)	763.9	-10290. (2982.)
4500.	0.09956 (0.00530)	0.09986	-0.00030	-12.0 (2.8)	765.7	-9204. (2136.)
5000.	0.09446 (0.00162)	0.09429	0.00017	-10.7 (1.7)	767.2	-8171. (1290.)
5500.	0.09110 (0.00550)	0.08964	0.00146	-9.0 (0.8)	768.4	-6898. (584.)
6000.	0.08306 (0.00709)	0.08558	-0.00252	-7.9 (0.7)	769.4	-6108. (568.)
6500.	0.08354 (0.00375)	0.08182	0.00172	-6.4 (0.9)	770.3	-4935. (728.)
7000.	0.07856 (0.00250)	0.07927	-0.00071	-5.8 (0.8)	771.0	-4445. (639.)
7500.	0.07714 (0.00749)	0.07676	0.00038	-5.0 (0.8)	771.7	-3866. (584.)
8000.	0.07364 (0.01095)	0.07443	-0.00079	-3.4 (0.6)	772.2	-2608. (497.)
8500.	0.07522 (0.01463)	0.07223	0.00299	-2.4 (0.8)	772.7	-1863. (628.)
9000.	0.06943 (0.00958)	0.07166	-0.00223	-1.1 (1.0)	773.1	-878. (800.)
9500.	0.06914 (0.01752)	0.07143	-0.00229	0.2 (1.4)	773.5	140. (1066.)
10000.	0.07358 (0.01580)	0.07184	0.00174	1.5 (0.9)	773.8	1159. (719.)
10500.	0.07426 (0.01613)	0.07292	0.00134	2.8 (0.6)	774.1	2178. (501.)
11000.	0.07376 (0.01793)	0.07466	-0.00090	4.1 (0.0)	774.4	3199. (0.)
z micras A	P04exp adim B	P04fit adim C	P04exp-P04fit adim D	dP04fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP04fit/dt sec-1 G
50.	0.15077 (0.00180)	0.14857	0.00220	212.8 (0.0)	511.4	108826. (0.)
100.	0.15939 (0.00147)	0.15882	0.00057	197.2 (4.0)	552.8	109012. (2224.)
150.	0.16787 (0.00452)	0.16830	-0.00043	181.7 (7.1)	583.5	106022. (4146.)
250.	0.17831 (0.00576)	0.18492	-0.00661	150.7 (19.3)	626.4	94398. (12090.)
350.	0.20090 (0.00919)	0.19844	0.00246	119.7 (38.4)	654.5	78344. (25152.)
450.	0.20895 (0.00418)	0.20915	-0.00020	90.6 (45.6)	674.0	61044. (30701.)
550.	0.21734 (0.00984)	0.21498	0.00236	63.2 (49.4)	688.3	43494. (33995.)
650.	0.22453 (0.01118)	0.21694	0.00759	34.8 (44.0)	699.2	24311. (30772.)
750.	0.21797 (0.00153)	0.21515	0.00282	-1.4 (29.9)	707.7	-999. (21160.)

1000.	0.20965(0.00132)	0.20860	0.00105	-30.9(27.1)	722.8	-22327.(19581.)
1250.	0.19627(0.00247)	0.19495	0.00132	-46.1(30.7)	732.7	-33799.(22472.)
1500.	0.18167(0.00257)	0.18145	0.00022	-51.2(28.4)	739.7	-37836.(21022.)
1750.	0.16972(0.00551)	0.16725	0.00247	-50.7(18.2)	744.9	-37774.(13542.)
2000.	0.15272(0.00186)	0.15402	-0.00130	-50.8(12.0)	748.9	-38037.(8957.)
2500.	0.13007(0.00293)	0.12946	0.00061	-44.8(6.4)	754.7	-33803.(4807.)
3000.	0.10687(0.00540)	0.10938	-0.00251	-37.9(5.3)	758.7	-28732.(4001.)
3500.	0.09441(0.00444)	0.09253	0.00188	-31.4(3.3)	761.6	-23876.(2490.)
4000.	0.07761(0.00242)	0.07938	-0.00177	-25.1(2.4)	763.9	-19204.(1818.)
4500.	0.07072(0.00179)	0.06908	0.00164	-20.3(2.9)	765.7	-15574.(2198.)
5000.	0.06000(0.00564)	0.06133	-0.00133	-16.4(3.2)	767.2	-12567.(2477.)
5500.	0.05484(0.00319)	0.05395	0.00089	-13.1(3.3)	768.4	-10058.(2544.)
6000.	0.04995(0.00249)	0.04876	0.00119	-9.7(2.5)	769.4	-7480.(1892.)
6500.	0.04439(0.00428)	0.04490	-0.00051	-8.2(2.1)	770.3	-6316.(1639.)
7000.	0.03933(0.00730)	0.04205	-0.00272	-6.5(1.6)	771.0	-4978.(1206.)
7500.	0.04064(0.00600)	0.03871	0.00193	-4.5(1.7)	771.7	-3471.(1327.)
8000.	0.04021(0.00842)	0.03718	0.00303	-3.1(1.5)	772.2	-2412.(1176.)
8500.	0.03383(0.01086)	0.03534	-0.00151	-0.3(1.3)	772.7	-210.(972.)
9000.	0.03313(0.01392)	0.03550	-0.00237	2.0(1.9)	773.1	1512.(1469.)
9500.	0.03877(0.00744)	0.03713	0.00164	4.6(1.7)	773.5	3552.(1348.)
10000.	0.03553(0.01151)	0.04009	-0.00456	7.2(2.4)	773.8	5593.(1823.)
10500.	0.04790(0.01853)	0.04436	0.00354	9.9(0.3)	774.1	7635.(240.)
11000.	0.04966(0.00945)	0.04995	-0.00029	12.5(0.0)	774.4	9680.(0.)

z micras A	P05exp adim B	P05fit adim C	P05exp-P05fit adim D	dP05fit/dz metros-l E	v m/s F	dP05fit/dt sec-l G
50.	0.07311(0.00212)	0.07625	-0.00314	57.2(0.0)	511.4	29242.(0.)
100.	0.07862(0.00223)	0.07890	-0.00028	49.2(12.2)	552.8	27209.(6722.)
150.	0.08644(0.00514)	0.08117	0.00527	41.3(17.8)	583.5	24075.(10357.)
250.	0.08590(0.00553)	0.08450	0.00140	25.3(16.1)	626.4	15879.(10091.)
350.	0.08134(0.00571)	0.08624	-0.00490	9.4(14.7)	654.5	6178.(9602.)
450.	0.08903(0.00480)	0.08510	0.00393	-6.1(16.5)	674.0	-4130.(11114.)
550.	0.08413(0.00130)	0.08335	0.00078	-17.5(14.1)	688.3	-12031.(9691.)
650.	0.08030(0.00802)	0.08052	-0.00022	-22.7(11.8)	699.2	-15837.(8265.)
750.	0.07869(0.00138)	0.07714	0.00155	-28.6(13.3)	707.7	-20219.(9405.)
1000.	0.06893(0.00051)	0.06730	0.00163	-37.9(6.4)	722.8	-27372.(4658.)
1250.	0.05721(0.00089)	0.05742	-0.00021	-35.7(8.5)	732.7	-26187.(6263.)
1500.	0.04887(0.00062)	0.04859	0.00028	-32.9(9.2)	739.7	-24351.(6826.)
1750.	0.03932(0.00069)	0.04066	-0.00134	-29.8(8.2)	744.9	-22183.(6077.)
2000.	0.03425(0.00225)	0.03474	-0.00049	-25.5(4.8)	748.9	-19089.(3580.)
2500.	0.02361(0.00106)	0.02478	-0.00117	-18.3(3.2)	754.7	-13796.(2404.)
3000.	0.01706(0.00249)	0.01779	-0.00073	-13.2(2.5)	758.7	-10015.(1876.)
3500.	0.01470(0.00301)	0.01323	0.00147	-9.5(4.2)	761.6	-7243.(3179.)
4000.	0.00873(0.00241)	0.00967	-0.00094	-7.1(4.1)	763.9	-5402.(3098.)
4500.	0.00763(0.00265)	0.00731	0.00032	-4.8(3.6)	765.7	-3672.(2724.)
5000.	0.00638(0.00294)	0.00531	0.00107	-3.2(3.0)	767.2	-2485.(2326.)
5500.	0.00380(0.00368)	0.00407	-0.00027	-1.7(1.6)	768.4	-1292.(1233.)
6000.	0.00317(0.00298)	0.00362	-0.00045	-0.1(0.8)	769.4	-97.(644.)
6500.	0.00409(0.00420)	0.00395	0.00014	1.4(0.0)	770.3	1102.(0.)

z micras A	P06exp adim B	P06fit adim C	P06exp-P06fit adim D	dP06fit/dz metros-l E	v m/s F	dP06fit/dt sec-l G
50.	0.13356(0.00306)	0.13814	-0.00458	34.8(0.0)	511.4	17797.(0.)
100.	0.14067(0.01180)	0.13955	0.00112	21.3(25.1)	552.8	11780.(13875.)
150.	0.14328(0.00244)	0.14027	0.00301	7.8(37.7)	583.5	4571.(22010.)
250.	0.14613(0.00834)	0.13971	0.00642	-19.1(41.8)	626.4	-11983.(26202.)
350.	0.13038(0.00619)	0.13645	-0.00607	-46.1(31.9)	654.5	-30166.(20905.)
450.	0.13237(0.00570)	0.12760	0.00477	-69.1(27.0)	674.0	-46600.(18191.)
550.	0.11942(0.00923)	0.11814	0.00128	-81.8(17.8)	688.3	-56289.(12245.)
650.	0.10857(0.00287)	0.10761	0.00096	-92.0(14.5)	699.2	-64340.(10152.)
750.	0.09899(0.00071)	0.09752	0.00147	-91.4(22.1)	707.7	-64670.(15605.)
1000.	0.07419(0.00047)	0.07470	-0.00051	-85.1(19.7)	722.8	-61532.(14268.)
1250.	0.05466(0.00127)	0.05700	-0.00234	-68.7(17.6)	732.7	-50300.(12910.)
1500.	0.04138(0.00171)	0.04302	-0.00164	-55.5(9.9)	739.7	-41046.(7316.)
1750.	0.03121(0.00314)	0.03245	-0.00124	-44.0(6.9)	744.9	-32753.(5135.)
2000.	0.02343(0.00167)	0.02502	-0.00159	-32.3(7.4)	748.9	-24212.(5576.)
2500.	0.01323(0.00197)	0.01490	-0.00167	-19.2(9.9)	754.7	-14520.(7475.)
3000.	0.00835(0.00227)	0.00717	0.00118	-11.6(12.0)	758.7	-8831.(9127.)
3500.	0.00580(0.00183)	0.00325	0.00255	-4.0(10.8)	761.6	-3081.(8210.)
4000.	0.00640(0.00134)	0.00313	0.00327	3.6(6.4)	763.9	2715.(4920.)
4500.	0.00337(0.00329)	0.00681	-0.00344	11.2(0.0)	765.7	8538.(0.)

z micras A	P07exp adim B	P07fit adim C	P07exp-P07fit adim D	dP07fit/dz metros-l E	v m/s F	dP07fit/dt sec-l G
50.	0.05847(0.00128)	0.05993	-0.00146	-10.4(0.0)	511.4	-5339.(0.)
100.	0.05900(0.00386)	0.05927	-0.00027	-16.0(15.0)	552.8	-8856.(8303.)
150.	0.05904(0.00386)	0.05833	0.00071	-21.6(22.7)	583.5	-12598.(13234.)
250.	0.05661(0.01067)	0.05561	0.00100	-32.7(22.5)	626.4	-20502.(14094.)
350.	0.05572(0.00990)	0.05178	0.00394	-43.9(15.0)	654.5	-28713.(9824.)
450.	0.04496(0.00178)	0.04495	0.00001	-50.5(8.8)	674.0	-34037.(5936.)

550.	0.03773(0.00394)	0.03868	-0.00095	-53.0(7.2)	688.3	-36459.(4951.)
650.	0.03235(0.01437)	0.03284	-0.00049	-54.2(10.0)	699.2	-37925.(6975.)
750.	0.02760(0.00046)	0.02806	-0.00046	-50.8(15.8)	707.7	-35930.(11196.)
1000.	0.01697(0.00182)	0.01850	-0.00153	-34.4(10.4)	722.8	-24886.(7539.)
1250.	0.01146(0.00121)	0.01113	0.00033	-24.6(3.7)	732.7	-17988.(2682.)
1500.	0.00783(0.00249)	0.00622	0.00161	-14.7(5.2)	739.7	-10851.(3824.)
1750.	0.00465(0.00131)	0.00379	0.00086	-4.8(5.9)	744.9	-3569.(4405.)
2000.	0.00263(0.00110)	0.00383	-0.00120	5.1(0.0)	748.9	3810.(0.)
z micras A	P08exp adim B	P08fit adim C	P08exp-P08fit adim D	dP08fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP08fit/dt sec-1 G
50.	0.10075(0.00302)	0.10111	-0.00036	-124.4(0.0)	511.4	-63618.(0.)
100.	0.09383(0.00236)	0.09495	-0.00112	-121.9(7.2)	552.8	-67386.(3977.)
150.	0.08997(0.00796)	0.08892	0.00105	-119.4(10.8)	583.5	-69670.(6290.)
250.	0.08092(0.00325)	0.07723	0.00369	-114.4(7.4)	626.4	-71660.(4607.)
350.	0.06105(0.00171)	0.06605	-0.00500	-109.3(6.5)	654.5	-71537.(4258.)
450.	0.05687(0.00453)	0.05442	0.00245	-101.6(8.1)	674.0	-68478.(5469.)
550.	0.04571(0.00567)	0.04433	0.00138	-93.5(7.8)	688.3	-64335.(5361.)
650.	0.03504(0.00304)	0.03590	-0.00086	-83.0(7.4)	699.2	-58048.(5147.)
750.	0.02652(0.00022)	0.02946	-0.00294	-66.6(9.8)	707.7	-47168.(6935.)
1000.	0.01452(0.00064)	0.01655	-0.00203	-47.3(3.6)	722.8	-34181.(2612.)
1250.	0.00812(0.00119)	0.00690	0.00122	-29.9(9.8)	732.7	-21922.(7152.)
1500.	0.00483(0.00118)	0.00159	0.00324	-12.6(12.6)	739.7	-9283.(9313.)
1750.	0.00274(0.00121)	0.00062	0.00212	4.8(5.8)	744.9	3594.(4300.)
2000.	0.00114(0.00165)	0.00400	-0.00286	22.2(0.0)	748.9	16626.(0.)
z micras A	P09exp adim B	P09fit adim C	P09exp-P09fit adim D	dP09fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP09fit/dt sec-1 G
50.	0.04365(0.00286)	0.04457	-0.00092	-92.1(0.0)	511.4	-47100.(0.)
100.	0.04137(0.00368)	0.04009	0.00128	-87.0(2.7)	552.8	-48083.(1513.)
150.	0.03654(0.00498)	0.03587	0.00067	-81.9(2.4)	583.5	-47765.(1386.)
250.	0.02650(0.00327)	0.02819	-0.00169	-71.6(1.7)	626.4	-44863.(1036.)
350.	0.02169(0.00743)	0.02137	0.00032	-63.2(0.9)	654.5	-41391.(610.)
450.	0.01684(0.00593)	0.01563	0.00121	-51.6(0.2)	674.0	-34751.(142.)
550.	0.01091(0.00566)	0.01106	-0.00015	-39.9(0.5)	688.3	-27443.(352.)
650.	0.00733(0.00204)	0.00766	-0.00033	-28.2(0.0)	699.2	-19710.(0.)
z micras A	P10exp adim B	P10fit adim C	P10exp-P10fit adim D	dP10fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP10fit/dt sec-1 G
50.	0.07982(0.00405)	0.08094	-0.00112	-243.8(0.0)	511.4	-124679.(0.)
100.	0.07021(0.00420)	0.06926	0.00095	-223.4(3.6)	552.8	-123496.(1965.)
150.	0.06100(0.00300)	0.05860	0.00240	-203.0(3.1)	583.5	-118451.(1784.)
250.	0.03678(0.00150)	0.04034	-0.00356	-162.2(2.1)	626.4	-101602.(1293.)
350.	0.02622(0.01073)	0.02593	0.00029	-123.5(1.1)	654.5	-80831.(701.)
450.	0.01838(0.00281)	0.01571	0.00267	-80.8(0.1)	674.0	-54426.(52.)
550.	0.00900(0.00402)	0.00978	-0.00078	-38.0(0.9)	688.3	-26121.(630.)
650.	0.00776(0.00520)	0.00812	-0.00036	4.9(0.0)	699.2	3391.(0.)
z micras A	P11exp adim B	P11fit adim C	P11exp-P11fit adim D	dP11fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP11fit/dt sec-1 G
50.	0.02971(0.00112)	0.02971	0.00000	-104.6(0.0)	511.4	-53492.(0.)
100.	0.02471(0.00116)	0.02471	0.00000	-95.3(2.6)	552.8	-52654.(1465.)
150.	0.02018(0.00585)	0.02018	0.00000	-80.6(2.6)	583.5	-47013.(1546.)
250.	0.01412(0.00921)	0.01412	0.00000	-40.6(0.0)	626.4	-25438.(0.)
z micras A	P12exp adim B	P12fit adim C	P12exp-P12fit adim D	dP12fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP12fit/dt sec-1 G
50.	0.04067(0.00426)	0.04107	-0.00040	-155.1(0.0)	511.4	-79318.(0.)
100.	0.03294(0.00604)	0.03384	-0.00090	-134.2(13.2)	552.8	-74186.(7319.)
150.	0.03053(0.00708)	0.02765	0.00288	-113.2(6.7)	583.5	-66052.(3894.)
250.	0.01611(0.00236)	0.01925	-0.00314	-84.3(6.5)	626.4	-52806.(4048.)
350.	0.01411(0.00232)	0.01159	0.00252	-68.7(19.6)	654.5	-44984.(12828.)
450.	0.00475(0.00000)	0.00550	-0.00075	-53.1(0.0)	674.0	-35823.(0.)
z micras A	P13exp adim B	P13fit adim C	P13exp-P13fit adim D	dP13fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP13fit/dt sec-1 G
50.	0.01395(0.00144)	0.01394	0.00001	-3.1(0.0)	511.4	-1601.(0.)
100.	0.01203(0.00266)	0.01203	0.00000	-73.5(0.0)	552.8	-40636.(0.)
150.	0.00659(0.00878)	0.00659	0.00000	-143.9(0.0)	583.5	-83966.(0.)
z micras A	P14exp adim B	P14fit adim C	P14exp-P14fit adim D	dP14fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP14fit/dt sec-1 G

```

50. 0.01709(0.00399) 0.01709 0.00000 12.0( 0.0) 511.4 6147.( 0.)
100. 0.01549(0.00284) 0.01548 0.00001 -76.1( 0.0) 552.8 -42068.( 0.)
150. 0.00948(0.00836) 0.00948 0.00000 -164.2( 0.0) 583.5 -95811.( 0.)

```

A: Posición de la tobera. z=0 no corresponde con el punto donde M=1.
 B: Población obtenida a partir de las intensidades medidas en el laboratorio.
 C: Ajuste puntual de la población.
 D: Diferencia entre la población experimental y la ajustada.
 E: Derivada en z de la población ajustada con su error.
 F: Velocidad de expansión.
 G: Derivada temporal de la población ($dP/dt=v*dP/dz$).

z micras H	nexp 10 ²² m-3 I	nfit 10 ²² m-3 J	nexp-nfit 10 ²² m-3 K	Ttpoint Kelvin L	Ttsmo Kelvin M	Trpoint Kelvin N	Trfit Kelvin O
50.	261.9730	275.6257	-13.6527	176.770	182.840(10.0)	136.460	136.480(2.7)
150.	154.8942	152.6812	2.2130	138.830	138.300(7.6)	115.920	114.930(2.5)
250.	86.9986	92.4947	-5.4961	107.020	110.030(6.2)	96.200	98.100(2.3)
350.	60.8354	60.2753	0.5601	94.160	91.070(5.6)	81.510	84.910(2.3)
450.	40.8652	41.7137	-0.8485	75.250	77.750(4.5)	76.650	74.490(0.5)
550.	30.4832	30.2949	0.1883	67.720	67.950(2.9)	66.960	66.210(0.4)
650.	22.9200	22.8679	0.0521	60.280	60.450(2.6)	59.950	59.570(0.5)
750.	17.9294	17.8080	0.1214	54.670	54.490(0.6)	54.300	54.200(0.1)
1000.	10.8326	10.5541	0.2785	44.420	43.780(0.6)	44.800	44.610(0.2)
1250.	7.0654	6.9358	0.1296	36.810	36.560(0.6)	38.740	38.420(0.1)
1500.	4.8282	4.8904	-0.0622	30.790	31.350(0.5)	34.600	34.110(0.1)
1750.	3.6100	3.6275	-0.0175	27.350	27.430(0.6)	30.900	30.910(0.2)
2000.	2.7533	2.7953	-0.0420	24.850	24.400(0.4)	27.200	28.390(0.2)
2500.	1.6976	1.8033	-0.1057	19.530	20.030(0.3)	24.070	24.620(0.1)
3000.	1.2915	1.2581	0.0334	17.520	17.040(0.4)	21.560	21.890(0.1)
3500.	0.9326	0.9271	0.0055	14.770	14.840(0.3)	20.110	19.850(0.1)
4000.	0.7519	0.7113	0.0406	13.090	13.130(0.5)	19.430	18.310(0.7)
4500.	0.5685	0.5630	0.0055	11.530	11.740(0.4)	17.780	17.130(0.2)
5000.	0.4192	0.4566	-0.0374	9.930	10.580(0.9)	16.390	16.230(0.0)
5500.	0.3720	0.3777	-0.0057	9.740	9.600(0.5)	14.980	15.550(0.3)
6000.	0.3301	0.3176	0.0125	9.220	8.750(0.5)	14.440	15.030(0.3)
6500.	0.2829	0.2709	0.0120	8.180	8.010(0.3)	14.810	14.630(0.0)
7000.	0.2445	0.2337	0.0108	7.660	7.360(0.2)	14.130	14.330(0.0)
7500.	0.2061	0.2037	0.0024	6.810	6.790(0.4)	14.200	14.100(0.1)
8000.	0.1831	0.1791	0.0040	6.340	6.280(0.3)	14.040	13.930(0.2)
8500.	0.1643	0.1587	0.0056	5.690	5.830(0.5)	14.820	13.790(0.6)
9000.	0.1424	0.1416	0.0008	5.550	5.430(0.2)	13.330	13.690(0.1)
9500.	0.1227	0.1271	-0.0044	4.920	5.080(0.3)	13.780	13.610(0.3)
10000.	0.1178	0.1148	0.0030	4.370	4.760(0.4)	15.780	13.550(1.0)
10500.	0.1126	0.1041	0.0085	4.470	4.470(0.3)	14.570	13.510(0.5)
11000.	0.0978	0.0949	0.0029	3.370	4.210(0.0)	19.360	13.470(0.0)

H: Posición de la tobera. z=0 no corresponde con el punto donde M=1.
 I: Densidad obtenida a partir de las intensidades de la banda Q ro-vibracional del n2.
 J: Ajuste de la densidad experimental.
 K: Diferencia entre la densidad experimental y la ajustada.
 L: Temperatura traslacional calculada a partir de los puntos experimentales de densidad y temperatura rotacional.
 M: Temperatura traslacional calculada a partir de los ajustes de los puntos experimentales de densidad y temperatura rotacional.
 N: Temperatura rotacional experimental.
 O: Ajuste de la temperatura rotacional.

```

*****
* CUADERNO DE LABORATORIO *
*****

```

POBLACIONES

Preparación del experimento

- 1) Pongo el cero del baratrón.
- 2) Enfoco la óptica a 60 cm-1 en estático con una presión de cámara de unos 50 mbar de N2.
- 3) Utilizo la Rayleigh para colocar la lámina de semionda. No toco el enfoque del sistema de colección. Lo más adecuado es utilizar la banda Q de la transición vibracional 2-1, pero los resultados con la Rayleigh son también buenos. La posición óptima es 133.4°
- 4) Centro la tobera en el eje de expansión con una rendija del monocromador de 50umx1mm. La tobera se ha ido -4.39 um desde el experimento anterior.
- 5) Coloco la pantalla.
- 6) Centro la tobera en el eje de colección a 2330 cm-1 con el eje de la lámina de semionda en la posición paralela a la polarización del haz láser. La posición con máxima señal (al menos eso parece) requiere mover la tobera +5.82 um desde la posición anterior (con el haz láser a 50um de la boca de tobera). Compruebo que la posición de la lámina de semionda obtenida anteriormente es lo suficientemente buena.

- 7) Reenfoco a 60 cm⁻¹ y coloco la lámina de semionda en la posición inicial.
 9) Medidas:

Condiciones experimentales:

- P0 (precámara, Baratrón 1 bar)=500.55(0.05) mbar
- T (ambiente)=22.5(0.5) °C=295.5(0.5) K
- P (cámara, Baratrón 1 bar)=0.060(0.005) mbar
- Potencia del láser (2045)=5.8 W@514.5 nm
- S2=7 mmx15 mm

z (um)	Archivos	Comentarios
50	00-02 00poblaciones.crg	Con pantalla, 50umx1mm, 5x40, T=10s, 2 fotos
100	03-05	
150	06-08	
250	09-11	
350	12-14	
450	00-02 01poblaciones.crg	Sin pantalla, 50umx1mm, 5x74, T=10s, 2 fotos
550	03-06	
650	07-09	
750	00-02 02poblaciones.crg	Sin pantalla, 100umx5mm, 5x350, T=30s, 2 fotos
1000	00-03 03poblaciones.crg	Sin pantalla, 100umx5mm, 5x350, T=30s, 2 fotos
1250	04-06	
1500	07-09	
1750	10-13	
2000	00-03 04poblaciones.crg	Sin pantalla, 150umx10mm, 5x400, T=30s, 2 fotos
2500	04-07	
3000	08-11	
3500	00-03 05poblaciones.crg	Sin pantalla, 150umx10mm, 5x400, T=60s, 2 fotos
4000	04-07	
4500	08-11	
5000	12-15	
5500	16-20	
6000	21-25	
6500	26-30	
7000	31-35	
7500	36-41	
8000	42-46	
8500	47-52	
9000	53-58	
9500	59-64	
10000	65-70	
10500	71-77	
11000	78-85	

Última posición de la tobera: -11000.07 um

DENSIDADES ABSOLUTAS

Consideraciones iniciales

Debido a que la señal nos permite llegar relativamente bien hasta 11mm, mediremos para 300, 900, 3000, 6000 y 9000 um sin utilizar la pantalla en ningún caso.

Preparación del experimento

- 1) Pongo el cero del baratrón.
- 2) Enfoco la óptica a 2330 cm⁻¹ en estático con una presión de cámara de unos 50 mbar de N₂.
- 3) Utilizo la banda Q roviibracional para colocar el eje de la lámina de semionda. La posición óptima es 87.8°.
- 4) Centro la tobera en el eje de expansión con una rendija del monocromador de 50umx1mm. La tobera se ha ido +4.34 um desde el experimento anterior.
- 5) Coloco la pantalla.
- 6) Centro la tobera en el eje de colección a 2330 cm⁻¹ utilizando una rendija para el monocromador de 150umx10mm, con un agrupamiento de 5x40 y con la pantalla. No parece haber variación alguna en un intervalo de +/-10 um centrado en el cero anterior. Lo dejo como está.
- 9) Medidas:

Condiciones experimentales:

- T (ambiente)=22.0(0.5) °C=295.0(0.5) K
- Potencia del láser (2045)=5.8W@514.5nm
- S2=7mmx15mm

z=300um

S=50umx1mm, Agrup.=5x40, T=30s
 Archivos=0#expansion300.crg, 0#estatico300.crg

#	Expansión		Archivos	Estático	
	P0_inicial(mbar)	P0_final(mbar)		P_camara(mbar)	Archivos
1	500.60(0.05)	500.25(0.05)	00-04	50.07(0.01)	00-04

```

2      500.70(0.05)      500.35(0.05)      00-04      50.12(0.01)      00-04
3      500.65(0.05)      500.20(0.05)      00-04      50.07(0.01)      00-04

```

z=900um

////////

S=100umx5mm, Agrup.=5x350, T=30s

Archivos=0#expansion900.crg, 0#estatico900.crg

	Expansión			Estático	
#	P0_inicial(mbar)	P0_final(mbar)	Archivos	P_camara(mbar)	Archivos
1	501.15(0.05)	500.80(0.05)	00-04	50.30(0.01)	00-04
2	501.05(0.05)	500.65(0.05)	00-04	50.30(0.01)	00-04
3	500.95(0.05)	-----(-) *	00-04	50.22(0.01)	00-04

z=3000um

////////

S=150umx10mm, Agrup.=5x400, T=30s

Archivos=0#expansion3000.crg, 0#estatico3000.crg

	Expansión			Estático	
#	P0_inicial(mbar)	P0_final(mbar)	Archivos	P_camara(mbar)	Archivos
1	500.45(0.05)	500.05(0.05)	00-04	10.46(0.01)	00-04
2	500.05(0.05)	499.75(0.05)	00-04	10.08(0.01)	00-04
3	500.00(0.05)	499.55(0.05)	00-04	10.26(0.01)	00-04

z=6000um

////////

S=150umx10mm, Agrup.=5x400, T=60s

Archivos=0#expansion6000.crg, 0#estatico6000.crg

	Expansión			Estático	
#	P0_inicial(mbar)	P0_final(mbar)	Archivos	P_camara(mbar)	Archivos
1	500.45(0.05)	499.95(0.05)	00-04	2.20(0.01)	00-04
2	500.40(0.05)	499.80(0.05)	00-04	2.34(0.01)	00-04
3	500.10(0.05)	499.55(0.05)	00-04	2.44(0.01)	00-04

z=9000um

////////

S=150umx10mm, Agrup.=5x400, T=60s

Archivos=0#expansion9000.crg, 0#estatico9000.crg

	Expansión			Estático	
#	P0_inicial(mbar)	P0_final(mbar)	Archivos	P_camara(mbar)	Archivos
1	499.95(0.05)	499.25(0.05)	00-04	1.42(0.01)	00-04
2	499.75(0.05)	499.25(0.05)	00-04	1.41(0.01)	00-04
3	499.75(0.05)	499.30(0.05)	00-04	1.50(0.01)	00-04

Última posición de la tobera: -90000.40 um

(*) No he escrito el dato al que se refiere el *.

DENSIDADES RELATIVAS

Consideraciones iniciales

.....

Las posiciones de tobera en las que mediremos serán las mismas que para las poblaciones, excepto para 100um, que aquí no hemos considerado.

Preparación del experimento

.....

- 1) Pongo el cero del baratrón (se ha ido unos 0.02 mbar).
- 2) Enfoco la óptica a 2330 cm-1 en estático con una presión de cámara de unos 50 mbar de N2.
- 3) Utilizo la banda Q rovibracional para colocar el eje de la lámina de semionda. La posición que maximiza la señal es 85.3°.
- 4) Centro la tobera en el eje de expansión con una rendija del monocromador de 50umx1mm. La tobera se ha ido +2.61 um desde el experimento anterior.
- 5) Coloco la pantalla.
- 6) Centro la tobera en el eje de colección a 2330 cm-1 utilizando una rendija para el monocromador de 150umx10mm y con la pantalla. Parece que a -5.08um de la posición anterior mejora algo la señal.
- 9) Medidas:

Condiciones experimentales:

- P0(precámara, Baratrón 1 bar, inicial)=200.80(0.05) mbar
- P0(precámara, Baratrón 1 bar, final)=197.35(0.05) mbar
- T(ambiente)=22.0(0.5) °C=295.0(0.5) K
- P(cámara, Baratrón 1 bar)=0.020(0.005) mbar
- Potencia del láser (2045)=5.8 W@514.5 nm

```

- S2=7 mmx15 mm

z (um)   Archivos      Comentarios
50       00-03 00densidad.crg   Con pantalla hasta 150um incluido
150      04-07              50umx1mm, 5x40, T=10s
150      08-11
250      12-15
350      16-21
350      00-03 01densidad.crg   Sin pantalla, 50umx1mm, 8x74, T=10s
450      04-07
550      08-11
650      12-15
650      00-03 02densidad.crg   Sin pantalla, 100umx5mm, 8x350, T=30s
750      04-07
1000     08-11
1250     12-15
1500     16-19
1750     20-23
1750     00-03 03densidad.crg   Sin pantalla, 150umx10mm, 5x400, T=30s
2000     04-07
2500     08-11
3000     12-16
3000     00-03 04densidad.crg   Sin pantalla, 150umx10mm, 5x400, T=60s
3500     04-07
4000     08-11
4500     12-16
5000     17-21
5500     22-27
6000     28-34
6500     35-40
7000     41-46
7500     47-49
7500     00-03 05densidad.crg   Sin pantalla, 150umx10mm, 5x400, T=60s
8000     04-08
8500     09-14
9000     15-20
9500     21-26
10000    27-32
10500    33-38
11000    39-44

```

Última posición de la tobera: -11000.22 um

D.4. Expansión de 200 mbar

FECHAS DE LOS EXPERIMENTOS:

- 25/10/05: Poblaciones
- 26/10/05: Densidades absolutas
- 27/10/05: Densidades relativas

DATOS REFERENTES A LOS EXPERIMENTOS:

Diámetro de tobera: 313 um

Presión en precámara medido con el baratrón (1bar):

- Poblaciones: 201.10(0.05) mbar
- Densidades absolutas: 199.50-200.55 mbar
- Densidades relativas: 200.80(0.05) mbar

Temperatura de precámara:

- Poblaciones: 295.0(0.5) K
- Densidades absolutas: 295(1) K (no lo apunté pero tanto el día anterior como el posterior la temperatura era la misma. Añado un error mayor para tener en cuenta posibles variaciones)
- Densidades relativas: 295.0(0.5) K

Potencia de láser: 5.8W@514.5nm

Ángulo de la lámina de semionda:

- Poblaciones: 133.4°
- Densidades absolutas: 88.0°
- Densidades relativas: 85.3°

CONDICIONES EXPERIMENTALES:

- Poblaciones:
 - 50-150um -> S=50umx1mm, Agrup=5x40, T=10s, Pantalla hasta 150um (incluido)
 - 200-500um -> S=50umx1mm, Agrup=5x74, T=10s, Sin pantalla
 - 600-900um -> S=100umx5mm, Agrup=5x250, T=10s

- 1000-1500um -> S=100umx10mm, Agrup=5x350, T=30s
 1750-2500um -> S=150umx10mm, Agrup=5x400, T=30s
 2750-7000um -> S=150umx10mm, Agrup=5x400, T=60s
 (S es la rendija de entrada al monocromador)
 - Densidades absolutas: Medidas hechas a 300, 900, 1800 y 3000um.
 - Densidades relativas:
 50-100um -> S=50umx1mm, Agrup=5x20, T=10s, Con pantalla
 100-200um -> S=50umx1mm, Agrup=5x40, T=10s, Sin pantalla
 200-500um -> S=50umx1mm, Agrup=5x74, T=10s
 500-900um -> S=100umx5mm, Agrup=5x250, T=10s
 900-1500um -> S=100umx10mm, Agrup=5x350, T=30s
 1500-2500um -> S=150umx10mm, Agrup=5x400, T=30s
 2500-7000um -> S=150umx10mm, Agrup=5x400, T=60s

z micras A	P00exp adim B	P00fit adim C	P00exp-P00fit adim D	dP00fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP00fit/dt sec-1 G
50.	0.02760(0.00536)	0.02634	0.00126	78.6(0.0)	544.5	42792.(0.)
100.	0.03150(0.00578)	0.03021	0.00129	76.0(5.8)	576.3	43805.(3364.)
150.	0.03222(0.00223)	0.03394	-0.00172	73.4(8.3)	601.1	44145.(4961.)
200.	0.03429(0.00299)	0.03755	-0.00326	70.9(7.0)	621.0	44004.(4345.)
250.	0.04013(0.00298)	0.04103	-0.00090	68.3(8.6)	637.3	43515.(5465.)
300.	0.04759(0.00371)	0.04472	0.00287	69.1(11.0)	650.7	44950.(7132.)
400.	0.04952(0.00428)	0.05123	-0.00171	64.5(8.1)	671.4	43292.(5450.)
500.	0.05969(0.00870)	0.05637	0.00332	57.6(4.6)	686.6	39528.(3138.)
600.	0.05984(0.00228)	0.06112	-0.00128	52.2(5.1)	698.0	36415.(3564.)
700.	0.06480(0.00328)	0.06619	-0.00139	48.8(8.2)	707.0	34495.(5799.)
800.	0.07016(0.00220)	0.07150	-0.00134	49.3(9.1)	714.2	35224.(6496.)
900.	0.07744(0.00264)	0.07644	0.00100	46.5(4.2)	720.0	33509.(3028.)
1000.	0.08200(0.00056)	0.08110	0.00090	48.6(3.9)	724.9	35237.(2796.)
1250.	0.09266(0.00169)	0.09251	0.00015	43.0(3.2)	734.2	31534.(2339.)
1500.	0.10204(0.00321)	0.10152	0.00052	38.1(1.0)	740.7	28250.(726.)
1750.	0.11010(0.00217)	0.11056	-0.00046	34.5(1.3)	745.6	25716.(986.)
2000.	0.11925(0.00179)	0.11897	0.00028	31.6(2.6)	749.4	23651.(1969.)
2250.	0.12451(0.00444)	0.12650	-0.00199	28.9(2.7)	752.5	21725.(2065.)
2500.	0.13600(0.00276)	0.13343	0.00257	26.5(0.5)	755.0	19977.(366.)
2750.	0.13958(0.00204)	0.13970	-0.00012	24.3(1.5)	757.0	18388.(1122.)
3000.	0.14459(0.00275)	0.14566	-0.00107	20.8(1.5)	758.7	15811.(1116.)
3250.	0.15009(0.00236)	0.15039	-0.00030	18.8(3.4)	760.2	14269.(2565.)
3500.	0.15485(0.00469)	0.15465	0.00020	14.4(4.0)	761.4	10934.(3030.)
3750.	0.15955(0.00568)	0.15855	0.00100	11.3(3.1)	762.5	8609.(2385.)
4000.	0.15906(0.00472)	0.16075	-0.00169	8.3(2.3)	763.4	6316.(1727.)
4250.	0.16507(0.00718)	0.16073	0.00434	7.5(2.7)	764.2	5728.(2035.)
4500.	0.16112(0.00899)	0.16213	-0.00101	6.0(4.0)	764.9	4594.(3025.)
4750.	0.16096(0.00599)	0.16424	-0.00328	5.0(5.7)	765.5	3850.(4358.)
5000.	0.16295(0.00559)	0.16711	-0.00416	5.5(5.6)	766.1	4182.(4286.)
5500.	0.17169(0.01103)	0.16887	0.00282	1.6(2.9)	767.0	1212.(2218.)
6000.	0.17211(0.01428)	0.16869	0.00342	-2.3(5.2)	767.7	-1765.(3969.)
6500.	0.16877(0.01647)	0.16657	0.00220	-6.2(4.5)	768.3	-4747.(3465.)
7000.	0.15954(0.01227)	0.16251	-0.00297	-10.1(0.0)	768.9	-7735.(0.)

z micras A	P01exp adim B	P01fit adim C	P01exp-P01fit adim D	dP01fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP01fit/dt sec-1 G
50.	0.03111(0.00466)	0.03385	-0.00274	52.3(0.0)	544.5	28461.(0.)
100.	0.03826(0.00495)	0.03658	0.00168	57.0(10.0)	576.3	32843.(5738.)
150.	0.03799(0.00472)	0.03955	-0.00156	61.7(10.3)	601.1	37100.(6215.)
200.	0.04648(0.00371)	0.04276	0.00372	66.4(9.0)	621.0	41259.(5605.)
250.	0.04800(0.00289)	0.04620	0.00180	71.2(13.0)	637.3	45350.(8304.)
300.	0.04820(0.00530)	0.04940	-0.00120	68.8(20.4)	650.7	44742.(13287.)
400.	0.06210(0.00680)	0.05850	0.00360	81.3(11.7)	671.4	54592.(7835.)
500.	0.05608(0.01591)	0.06751	-0.01143	81.3(9.6)	686.6	55793.(6582.)
600.	0.08233(0.00250)	0.07663	0.00570	82.4(16.1)	698.0	57494.(11252.)
700.	0.08923(0.00450)	0.08528	0.00395	79.3(21.5)	707.0	56037.(15179.)
800.	0.09199(0.00321)	0.09284	-0.00085	72.7(14.7)	714.2	51908.(10506.)
900.	0.09845(0.00344)	0.09931	-0.00086	70.4(14.3)	720.0	50695.(10274.)
1000.	0.10537(0.00154)	0.10441	0.00096	50.4(7.8)	724.9	36549.(5654.)
1250.	0.11748(0.00156)	0.11589	0.00159	44.1(3.7)	734.2	32386.(2730.)
1500.	0.12520(0.00217)	0.12661	-0.00141	38.8(8.0)	740.7	28710.(5896.)
1750.	0.13524(0.00228)	0.13425	0.00099	34.1(8.9)	745.6	25410.(6667.)
2000.	0.14194(0.00364)	0.14235	-0.00041	29.2(2.4)	749.4	21875.(1810.)
2250.	0.14964(0.00370)	0.14918	0.00046	25.0(2.4)	752.5	18805.(1814.)
2500.	0.15194(0.00365)	0.15558	-0.00364	20.3(3.0)	755.0	15357.(2230.)
2750.	0.16434(0.00373)	0.15940	0.00494	17.3(3.5)	757.0	13126.(2625.)
3000.	0.16272(0.00504)	0.16309	-0.00037	14.6(3.1)	758.7	11069.(2335.)
3250.	0.16599(0.00465)	0.16670	-0.00071	9.8(2.3)	760.2	7466.(1756.)
3500.	0.16433(0.00254)	0.16863	-0.00430	6.7(2.8)	761.4	5130.(2117.)
3750.	0.17260(0.00449)	0.16856	0.00404	3.8(3.1)	762.5	2906.(2400.)
4000.	0.17283(0.00871)	0.17037	0.00246	1.8(3.0)	763.4	1360.(2261.)
4250.	0.16627(0.00727)	0.17018	-0.00391	-0.5(3.0)	764.2	-408.(2329.)
4500.	0.16905(0.00465)	0.16911	-0.00006	-2.1(3.0)	764.9	-1577.(2281.)
4750.	0.17162(0.01036)	0.16741	0.00421	-5.4(2.5)	765.5	-4109.(1915.)
5000.	0.16440(0.00715)	0.16704	-0.00264	-5.3(2.8)	766.1	-4059.(2129.)

5500.	0.16216(0.00960)	0.16387	-0.00171	-7.4(3.2)	767.0	-5665.(2420.)
6000.	0.16083(0.01962)	0.15966	0.00117	-9.5(2.3)	767.7	-7272.(1729.)
6500.	0.15736(0.00673)	0.15440	0.00296	-11.6(2.7)	768.3	-8882.(2084.)
7000.	0.14606(0.00904)	0.14810	-0.00204	-13.7(0.0)	768.9	-10495.(0.)
z micras A	P02exp adim B	P02fit adim C	P02exp-P02fit adim D	dP02fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP02fit/dt sec-1 G
50.	0.10949(0.00323)	0.11223	-0.00274	201.7(0.0)	544.5	109826.(0.)
100.	0.12563(0.00883)	0.12234	0.00329	202.8(2.4)	576.3	116874.(1355.)
150.	0.13176(0.00490)	0.13251	-0.00075	203.9(19.3)	601.1	122564.(11619.)
200.	0.14558(0.00204)	0.14273	0.00285	205.0(22.2)	621.0	127305.(13786.)
250.	0.14875(0.01007)	0.15301	-0.00426	206.1(24.5)	637.3	131348.(15620.)
300.	0.16666(0.00979)	0.16364	0.00302	200.7(18.8)	650.7	130595.(12259.)
400.	0.18256(0.00695)	0.18579	-0.00323	202.6(6.4)	671.4	136026.(4289.)
500.	0.20393(0.02124)	0.20609	-0.00216	187.9(14.7)	686.6	129012.(10114.)
600.	0.22767(0.00290)	0.22451	0.00316	173.8(22.9)	698.0	121312.(15970.)
700.	0.24304(0.00487)	0.24007	0.00297	153.1(22.4)	707.0	108242.(15844.)
800.	0.25269(0.00792)	0.25373	-0.00104	139.8(15.2)	714.2	99845.(10884.)
900.	0.26527(0.00447)	0.26504	0.00023	120.1(11.7)	720.0	86472.(8410.)
1000.	0.27809(0.00302)	0.27622	0.00187	103.9(11.3)	724.9	75317.(8220.)
1250.	0.29791(0.00295)	0.29948	-0.00157	83.8(12.9)	734.2	61548.(9442.)
1500.	0.31729(0.00559)	0.31691	0.00038	67.1(12.9)	740.7	49731.(9555.)
1750.	0.33486(0.00573)	0.33055	0.00431	52.8(7.1)	745.6	39398.(5321.)
2000.	0.33984(0.00460)	0.34097	-0.00113	42.2(8.3)	749.4	31595.(6220.)
2250.	0.34622(0.00794)	0.34967	-0.00345	32.5(9.8)	752.5	24479.(7377.)
2500.	0.35605(0.00226)	0.35584	0.00021	23.8(7.2)	755.0	17931.(5455.)
2750.	0.36067(0.00634)	0.36040	0.00027	16.8(4.9)	757.0	12740.(3740.)
3000.	0.36689(0.00544)	0.36324	0.00365	16.0(5.7)	758.7	12170.(4303.)
3250.	0.36573(0.00986)	0.36666	-0.00093	12.1(5.5)	760.2	9214.(4197.)
3500.	0.36607(0.01561)	0.36894	-0.00287	7.4(4.2)	761.4	5608.(3174.)
3750.	0.36585(0.00657)	0.37035	-0.00450	4.6(3.9)	762.5	3539.(2991.)
4000.	0.37900(0.00894)	0.37155	0.00745	0.9(2.1)	763.4	718.(1605.)
4250.	0.37208(0.01171)	0.37109	0.00099	0.6(1.9)	764.2	474.(1440.)
4500.	0.36903(0.00827)	0.37065	-0.00162	-1.4(2.2)	764.9	-1043.(1679.)
4750.	0.37006(0.01861)	0.36918	0.00088	-4.1(2.2)	765.5	-3169.(1700.)
5000.	0.36413(0.01024)	0.36926	-0.00513	-7.6(2.7)	766.1	-5839.(2067.)
5500.	0.36664(0.01498)	0.36468	0.00196	-10.7(2.2)	767.0	-8184.(1723.)
6000.	0.36041(0.01673)	0.35859	0.00182	-13.7(2.8)	767.7	-10533.(2146.)
6500.	0.35788(0.01632)	0.35097	0.00691	-16.8(3.5)	768.3	-12877.(2707.)
7000.	0.33645(0.01322)	0.34182	-0.00537	-19.8(0.0)	768.9	-15232.(0.)
z micras A	P03exp adim B	P03fit adim C	P03exp-P03fit adim D	dP03fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP03fit/dt sec-1 G
50.	0.06234(0.00572)	0.06599	-0.00365	72.4(0.0)	544.5	39433.(0.)
100.	0.06898(0.00580)	0.06971	-0.00073	76.3(6.1)	576.3	43943.(3506.)
150.	0.07597(0.00424)	0.07362	0.00235	80.1(5.7)	601.1	48136.(3410.)
200.	0.08146(0.00570)	0.07772	0.00374	83.9(12.3)	621.0	52108.(7645.)
250.	0.08167(0.00819)	0.08201	-0.00034	87.7(18.5)	637.3	55910.(11777.)
300.	0.08995(0.00549)	0.08659	0.00336	82.7(18.6)	650.7	53800.(12129.)
400.	0.09862(0.01735)	0.09606	0.00256	85.1(10.7)	671.4	57143.(7177.)
500.	0.09012(0.01196)	0.10656	-0.01644	83.0(12.0)	686.6	56967.(8212.)
600.	0.12619(0.00181)	0.11565	0.01054	74.9(25.7)	698.0	52245.(17925.)
700.	0.12512(0.00422)	0.12238	0.00274	62.2(29.7)	707.0	43940.(20998.)
800.	0.13032(0.00362)	0.12760	0.00272	54.1(26.6)	714.2	38660.(18991.)
900.	0.12969(0.00436)	0.13103	-0.00134	44.5(21.1)	720.0	32004.(15228.)
1000.	0.13303(0.00294)	0.13233	0.00070	13.5(9.5)	724.9	9808.(6860.)
1250.	0.13577(0.00575)	0.13518	0.00059	8.5(9.9)	734.2	6234.(7302.)
1500.	0.13565(0.00562)	0.13583	-0.00018	1.7(15.0)	740.7	1244.(11140.)
1750.	0.13564(0.00236)	0.13502	0.00062	-1.7(14.3)	745.6	-1262.(10647.)
2000.	0.13428(0.00133)	0.13380	0.00048	-5.4(3.2)	749.4	-4080.(2427.)
2250.	0.13044(0.00483)	0.13149	-0.00105	-7.4(4.2)	752.5	-5575.(3159.)
2500.	0.12827(0.00489)	0.12879	-0.00052	-7.4(4.3)	755.0	-5570.(3237.)
2750.	0.12857(0.00319)	0.12685	0.00172	-8.1(3.3)	757.0	-6142.(2487.)
3000.	0.12300(0.00347)	0.12496	-0.00196	-8.2(2.9)	758.7	-6189.(2214.)
3250.	0.12251(0.00403)	0.12327	-0.00076	-8.0(2.3)	760.2	-6044.(1714.)
3500.	0.12394(0.00810)	0.12157	0.00237	-9.3(2.4)	761.4	-7054.(1821.)
3750.	0.11825(0.00851)	0.11900	-0.00075	-10.2(2.1)	762.5	-7755.(1613.)
4000.	0.11651(0.00676)	0.11604	0.00047	-8.6(2.0)	763.4	-6565.(1502.)
4250.	0.11437(0.00407)	0.11348	0.00089	-9.2(2.1)	764.2	-7019.(1613.)
4500.	0.10849(0.00924)	0.11107	-0.00258	-9.3(2.8)	764.9	-7133.(2117.)
4750.	0.10725(0.01291)	0.10990	-0.00265	-7.9(2.7)	765.5	-6011.(2080.)
5000.	0.11089(0.00795)	0.10781	0.00308	-7.6(0.6)	766.1	-5843.(466.)
5500.	0.10414(0.01614)	0.10396	0.00018	-7.8(1.9)	767.0	-5960.(1420.)
6000.	0.10185(0.01054)	0.10004	0.00181	-7.9(3.2)	767.7	-6074.(2437.)
6500.	0.09383(0.01527)	0.09605	-0.00222	-8.1(0.3)	768.3	-6189.(248.)
7000.	0.09257(0.01600)	0.09199	0.00058	-8.2(0.0)	768.9	-6303.(0.)
z micras A	P04exp adim B	P04fit adim C	P04exp-P04fit adim D	dP04fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP04fit/dt sec-1 G
50.	0.15270(0.00663)	0.14881	0.00389	210.4(0.0)	544.5	114563.(0.)

100.	0.15702(0.00937)	0.15898	-0.00196	196.2(19.2)	576.3	113070.(11059.)
150.	0.16020(0.01159)	0.16843	-0.00823	182.0(15.7)	601.1	109400.(9443.)
200.	0.18169(0.00322)	0.17718	0.00451	167.8(17.4)	621.0	104204.(10830.)
250.	0.18691(0.00897)	0.18522	0.00169	153.7(12.3)	637.3	97953.(7832.)
300.	0.19418(0.00338)	0.19373	0.00045	150.0(22.0)	650.7	97605.(14322.)
400.	0.20202(0.01066)	0.20597	-0.00395	112.1(27.9)	671.4	75264.(18705.)
500.	0.21748(0.02141)	0.21374	0.00374	69.2(29.7)	686.6	47540.(20385.)
600.	0.22044(0.00293)	0.21993	0.00051	40.0(29.3)	698.0	27941.(20437.)
700.	0.21930(0.00423)	0.22038	-0.00108	17.8(29.8)	707.0	12549.(21033.)
800.	0.22286(0.01064)	0.21841	0.00445	-1.5(23.4)	714.2	-1063.(16705.)
900.	0.21904(0.00491)	0.21520	0.00384	-23.6(18.0)	720.0	-16992.(12967.)
1000.	0.20938(0.00244)	0.21151	-0.00213	-33.8(20.0)	724.9	-24465.(14491.)
1250.	0.19983(0.00108)	0.20100	-0.00117	-40.5(21.6)	734.2	-29735.(15829.)
1500.	0.19222(0.00771)	0.19038	0.00184	-42.0(15.0)	740.7	-31102.(11111.)
1750.	0.18032(0.00208)	0.18037	-0.00005	-39.6(8.4)	745.6	-29548.(6276.)
2000.	0.16952(0.00596)	0.17106	-0.00154	-37.1(5.3)	749.4	-27795.(3965.)
2250.	0.16299(0.00426)	0.16119	0.00180	-34.9(1.4)	752.5	-26225.(1081.)
2500.	0.15197(0.00873)	0.15202	-0.00005	-31.7(1.8)	755.0	-23949.(1344.)
2750.	0.14410(0.00107)	0.14468	-0.00058	-27.8(3.1)	757.0	-21014.(2315.)
3000.	0.13653(0.00578)	0.13864	-0.00211	-25.2(3.1)	758.7	-19134.(2327.)
3250.	0.13339(0.00400)	0.13256	0.00083	-22.2(3.2)	760.2	-16854.(2458.)
3500.	0.12969(0.00954)	0.12714	0.00255	-16.1(3.5)	761.4	-12274.(2652.)
3750.	0.12476(0.01056)	0.12354	0.00122	-11.6(4.2)	762.5	-8876.(3174.)
4000.	0.11744(0.00607)	0.12177	-0.00433	-9.2(3.4)	763.4	-7030.(2589.)
4250.	0.11712(0.00969)	0.12055	-0.00343	-8.1(3.7)	764.2	-6177.(2813.)
4500.	0.12344(0.00868)	0.11958	0.00386	-6.5(5.1)	764.9	-4953.(3931.)
4750.	0.12147(0.01165)	0.11864	0.00283	-4.7(5.5)	765.5	-3586.(4226.)
5000.	0.11597(0.01263)	0.11404	0.00193	-4.5(3.8)	766.1	-3480.(2876.)
5500.	0.11379(0.01249)	0.11287	0.00092	-0.1(3.5)	767.0	-103.(2704.)
6000.	0.10984(0.01957)	0.11390	-0.00406	4.3(6.3)	767.7	3280.(4864.)
6500.	0.10629(0.01581)	0.11714	-0.01085	8.7(9.3)	768.3	6670.(7132.)
7000.	0.13096(0.02747)	0.12259	0.00837	13.1(0.0)	768.9	10065.(0.)
z	P05exp	P05fit	P05exp-P05fit	dP05fit/dz	v	dP05fit/dt
micras	adim	adim	adim	metros-1	m/s	sec-1
A	B	C	D	E	F	G
50.	0.07270(0.00160)	0.07316	-0.00046	24.7(0.0)	544.5	13471.(0.)
100.	0.06733(0.00446)	0.07431	-0.00698	21.5(5.0)	576.3	12419.(2871.)
150.	0.07826(0.01072)	0.07531	0.00295	18.3(19.8)	601.1	11030.(11914.)
200.	0.08183(0.00602)	0.07615	0.00568	15.2(17.0)	621.0	9414.(10538.)
250.	0.08185(0.00640)	0.07683	0.00502	12.0(14.1)	637.3	7628.(8992.)
300.	0.07874(0.00231)	0.07693	0.00181	7.3(13.9)	650.7	4757.(9038.)
400.	0.07002(0.01011)	0.07676	-0.00674	-8.7(14.6)	671.4	-5839.(9776.)
500.	0.07332(0.01161)	0.07659	-0.00327	-9.2(10.4)	686.6	-6294.(7141.)
600.	0.08190(0.00407)	0.07648	0.00542	-8.2(11.7)	698.0	-5716.(8132.)
700.	0.07879(0.00177)	0.07664	0.00215	-9.9(15.0)	707.0	-7008.(10619.)
800.	0.07448(0.00470)	0.07496	-0.00048	-10.6(18.0)	714.2	-7571.(12827.)
900.	0.07210(0.00206)	0.07184	0.00026	-22.7(12.2)	720.0	-16344.(8784.)
1000.	0.07046(0.00099)	0.06839	0.00207	-33.0(6.8)	724.9	-23951.(4931.)
1250.	0.05892(0.00175)	0.05985	-0.00093	-31.1(8.5)	734.2	-22848.(6249.)
1500.	0.05269(0.00109)	0.05237	0.00032	-27.3(11.5)	740.7	-20214.(8540.)
1750.	0.04620(0.00182)	0.04630	-0.00010	-24.1(6.4)	745.6	-17954.(4778.)
2000.	0.03982(0.00181)	0.04083	-0.00101	-20.6(3.4)	749.4	-15430.(2555.)
2250.	0.03746(0.00277)	0.03648	0.00098	-16.0(1.7)	752.5	-12040.(1247.)
2500.	0.03423(0.00404)	0.03293	0.00130	-13.1(1.7)	755.0	-9875.(1247.)
2750.	0.02879(0.00360)	0.03063	-0.00184	-11.2(1.9)	757.0	-8456.(1410.)
3000.	0.02728(0.00311)	0.02854	-0.00126	-9.8(2.2)	758.7	-7457.(1693.)
3250.	0.02808(0.00488)	0.02557	0.00251	-7.3(2.3)	760.2	-5538.(1720.)
3500.	0.02568(0.01115)	0.02393	0.00175	-4.7(2.4)	761.4	-3598.(1813.)
3750.	0.02133(0.00361)	0.02367	-0.00234	-3.4(2.0)	762.5	-2626.(1507.)
4000.	0.01951(0.00466)	0.02287	-0.00336	-2.8(2.3)	763.4	-2105.(1784.)
4250.	0.02530(0.00963)	0.02246	0.00284	-2.4(2.8)	764.2	-1855.(2113.)
4500.	0.02470(0.00655)	0.02253	0.00217	-1.2(2.8)	764.9	-955.(2119.)
4750.	0.02074(0.01029)	0.02183	-0.00109	0.0(1.1)	765.5	-10.(816.)
5000.	0.02195(0.00717)	0.02089	0.00106	-0.4(1.2)	766.1	-324.(921.)
5500.	0.02126(0.01342)	0.02129	-0.00003	2.0(1.9)	767.0	1542.(1490.)
6000.	0.01969(0.01122)	0.02290	-0.00321	4.4(3.3)	767.7	3412.(2546.)
6500.	0.02528(0.01280)	0.02573	-0.00045	6.9(2.6)	768.3	5284.(2028.)
7000.	0.03132(0.01422)	0.02978	0.00154	9.3(0.0)	768.9	7159.(0.)
z	P06exp	P06fit	P06exp-P06fit	dP06fit/dz	v	dP06fit/dt
micras	adim	adim	adim	metros-1	m/s	sec-1
A	B	C	D	E	F	G
50.	0.14046(0.00675)	0.14305	-0.00259	3.4(0.0)	544.5	1833.(0.)
100.	0.14796(0.00317)	0.14298	0.00498	-6.1(8.6)	576.3	-3532.(4934.)
150.	0.13821(0.01759)	0.14244	-0.00423	-15.6(8.3)	601.1	-9389.(5011.)
200.	0.14055(0.00236)	0.14142	-0.00087	-25.1(11.8)	621.0	-15600.(7297.)
250.	0.14152(0.00318)	0.13993	0.00159	-34.6(22.3)	637.3	-22063.(14186.)
300.	0.14398(0.01107)	0.13760	0.00638	-50.8(26.8)	650.7	-33036.(17458.)
400.	0.12846(0.00864)	0.13240	-0.00394	-59.6(21.4)	671.4	-40022.(14341.)
500.	0.12190(0.01327)	0.12440	-0.00250	-80.0(11.8)	686.6	-54949.(8068.)
600.	0.11887(0.00222)	0.11435	0.00452	-88.2(7.4)	698.0	-61550.(5166.)
700.	0.10578(0.00482)	0.10402	0.00176	-87.3(12.8)	707.0	-61749.(9050.)
800.	0.09434(0.00151)	0.09579	-0.00145	-81.3(21.2)	714.2	-58057.(15170.)

900.	0.08390 (0.00844)	0.08736	-0.00346	-81.3 (16.2)	720.0	-58514. (11664.)
1000.	0.07968 (0.00126)	0.07958	0.00010	-78.3 (9.9)	724.9	-56760. (7190.)
1250.	0.06470 (0.00279)	0.06252	0.00218	-60.7 (4.9)	734.2	-44544. (3612.)
1500.	0.04866 (0.00485)	0.04992	-0.00126	-47.4 (5.7)	740.7	-35094. (4243.)
1750.	0.03871 (0.00329)	0.03976	-0.00105	-37.0 (5.9)	745.6	-27595. (4417.)
2000.	0.03118 (0.00571)	0.03198	-0.00080	-29.1 (7.5)	749.4	-21808. (5589.)
2250.	0.02834 (0.00146)	0.02674	0.00160	-21.9 (6.8)	752.5	-16487. (5148.)
2500.	0.02265 (0.00371)	0.02329	-0.00064	-15.5 (5.1)	755.0	-11703. (3824.)
2750.	0.02152 (0.00374)	0.02052	0.00100	-11.3 (5.3)	757.0	-8547. (4048.)
3000.	0.01852 (0.00143)	0.01890	-0.00038	-9.7 (6.0)	758.7	-7377. (4560.)
3250.	0.01586 (0.00297)	0.01668	-0.00082	-8.4 (5.2)	760.2	-6412. (3990.)
3500.	0.01572 (0.00321)	0.01477	0.00095	-6.2 (3.2)	761.4	-4755. (2436.)
3750.	0.01523 (0.00463)	0.01283	0.00240	-4.4 (2.7)	762.5	-3321. (2047.)
4000.	0.00943 (0.00615)	0.01223	-0.00280	-3.0 (1.9)	763.4	-2303. (1437.)
4250.	0.01048 (0.00739)	0.01260	-0.00212	-3.3 (1.6)	764.2	-2498. (1260.)
4500.	0.01222 (0.00519)	0.01097	0.00125	-2.2 (2.2)	764.9	-1706. (1716.)
4750.	0.01419 (0.00596)	0.00975	0.00444	-0.7 (2.9)	765.5	-501. (2244.)
5000.	0.01141 (0.00833)	0.01052	0.00089	1.9 (2.9)	766.1	1423. (2212.)
5500.	0.00602 (0.00954)	0.01218	-0.00616	4.8 (4.8)	767.0	3678. (3693.)
6000.	0.01465 (0.01704)	0.01531	-0.00066	7.7 (2.3)	767.7	5936. (1743.)
6500.	0.02360 (0.00737)	0.01991	0.00369	10.7 (1.8)	768.3	8198. (1389.)
7000.	0.02487 (0.01981)	0.02598	-0.00111	13.6 (0.0)	768.9	10457. (0.)
z micras A	P07exp adim B	P07fit adim C	P07exp-P07fit adim D	dP07fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP07fit/dt sec-1 G
50.	0.04926 (0.00366)	0.05510	-0.00584	-15.6 (0.0)	544.5	-8516. (0.)
100.	0.05761 (0.00764)	0.05419	0.00342	-20.7 (25.5)	576.3	-11947. (14696.)
150.	0.05301 (0.01112)	0.05303	-0.00002	-25.8 (22.0)	601.1	-15520. (13230.)
200.	0.05661 (0.00436)	0.05161	0.00500	-30.9 (21.8)	621.0	-19195. (13550.)
250.	0.05368 (0.00700)	0.04994	0.00374	-36.0 (17.4)	637.3	-22943. (11089.)
300.	0.04767 (0.00646)	0.04657	0.00110	-56.6 (8.6)	650.7	-36843. (5144.)
400.	0.03644 (0.01243)	0.04143	-0.00499	-52.8 (6.9)	671.4	-35450. (4662.)
500.	0.03477 (0.01873)	0.03637	-0.00160	-52.1 (8.9)	686.6	-35799. (6144.)
600.	0.03508 (0.00283)	0.03183	0.00325	-44.1 (10.6)	698.0	-30789. (7392.)
700.	0.03013 (0.00227)	0.02822	0.00191	-36.6 (4.7)	707.0	-25897. (3317.)
800.	0.02443 (0.00527)	0.02496	-0.00053	-30.5 (3.7)	714.2	-21805. (2633.)
900.	0.01945 (0.00364)	0.02159	-0.00214	-31.6 (4.5)	720.0	-22745. (3260.)
1000.	0.01876 (0.00150)	0.01872	0.00004	-30.4 (4.6)	724.9	-22059. (3370.)
1250.	0.01284 (0.00297)	0.01348	-0.00064	-20.8 (0.8)	734.2	-15235. (580.)
1500.	0.00890 (0.00220)	0.00886	0.00004	-16.1 (2.7)	740.7	-11962. (2027.)
1750.	0.00655 (0.00124)	0.00540	0.00115	-11.5 (4.0)	745.6	-8604. (3003.)
2000.	0.00492 (0.00424)	0.00309	0.00183	-6.9 (5.8)	749.4	-5193. (4352.)
2250.	0.00026 (0.00434)	0.00194	-0.00168	-2.3 (0.0)	752.5	-1746. (0.)
z micras A	P08exp adim B	P08fit adim C	P08exp-P08fit adim D	dP08fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP08fit/dt sec-1 G
50.	0.10144 (0.00347)	0.09852	0.00292	-52.1 (0.0)	544.5	-28352. (0.)
100.	0.08694 (0.00438)	0.09566	-0.00872	-62.1 (4.9)	576.3	-35794. (2815.)
150.	0.09877 (0.01398)	0.09231	0.00646	-72.2 (36.3)	601.1	-43375. (21808.)
200.	0.08927 (0.00410)	0.08845	0.00082	-82.2 (30.3)	621.0	-51046. (18841.)
250.	0.08817 (0.00880)	0.08409	0.00408	-92.2 (29.6)	637.3	-58785. (18832.)
300.	0.06980 (0.00676)	0.07816	-0.00836	-96.0 (22.7)	650.7	-62467. (14764.)
400.	0.07364 (0.01071)	0.06514	0.00850	-119.4 (6.3)	671.4	-80165. (4253.)
500.	0.05261 (0.02017)	0.05344	-0.00083	-107.3 (16.5)	686.6	-73672. (11336.)
600.	0.03985 (0.00352)	0.04271	-0.00286	-95.2 (28.8)	698.0	-66436. (20068.)
700.	0.03375 (0.00462)	0.03441	-0.00066	-77.9 (25.9)	707.0	-55104. (18318.)
800.	0.02662 (0.00466)	0.02716	-0.00054	-74.0 (14.9)	714.2	-52837. (10634.)
900.	0.02102 (0.00355)	0.02268	-0.00166	-52.1 (6.6)	720.0	-37498. (4779.)
1000.	0.01752 (0.00182)	0.01826	-0.00074	-40.5 (4.5)	724.9	-29351. (3292.)
1250.	0.01157 (0.00377)	0.01116	0.00041	-25.6 (10.3)	734.2	-18810. (7526.)
1500.	0.00646 (0.00338)	0.00607	0.00039	-15.2 (18.8)	740.7	-11222. (13955.)
1750.	0.00267 (0.00242)	0.00359	-0.00092	-4.7 (7.1)	745.6	-3489. (5281.)
2000.	0.00687 (0.00292)	0.00373	0.00314	5.8 (5.7)	749.4	4338. (4272.)
2250.	0.00461 (0.00460)	0.00648	-0.00187	16.3 (0.0)	752.5	12236. (0.)
z micras A	P09exp adim B	P09fit adim C	P09exp-P09fit adim D	dP09fit/dz metros-1 E	v m/s F	dP09fit/dt sec-1 G
50.	0.06934 (0.00748)	0.06130	0.00804	15.7 (0.0)	544.5	8538. (0.)
100.	0.05967 (0.00151)	0.06172	-0.00205	0.9 (23.1)	576.3	541. (13318.)
150.	0.06806 (0.00459)	0.06140	0.00666	-13.8 (20.7)	601.1	-8295. (12413.)
200.	0.04840 (0.00329)	0.06034	-0.01194	-28.5 (17.1)	621.0	-17723. (10650.)
250.	0.04688 (0.00285)	0.05854	-0.01166	-43.3 (23.3)	637.3	-27582. (14817.)
300.	0.05110 (0.00133)	0.05678	-0.00568	-37.7 (49.1)	650.7	-24525. (31975.)
400.	0.05477 (0.00861)	0.04793	0.00684	-68.1 (40.4)	671.4	-45695. (27091.)
500.	0.06585 (0.01078)	0.03842	0.02743	-66.4 (32.5)	686.6	-45618. (22294.)
600.	0.00784 (0.00040)	0.02895	-0.02111	-73.5 (49.4)	698.0	-51282. (34481.)
700.	0.01006 (0.00091)	0.01902	-0.00896	-71.3 (59.1)	707.0	-50423. (41770.)
800.	0.01212 (0.00103)	0.01238	-0.00026	-68.8 (47.0)	714.2	-49130. (33596.)
900.	0.01366 (0.00122)	0.00961	0.00405	-49.0 (36.9)	720.0	-35309. (26561.)
1000.	0.00571 (0.00060)	0.00949	-0.00378	-0.5 (24.9)	724.9	-343. (18036.)

1250.	0.00832(0.00073)	0.00894	-0.00062	-0.7(14.2)	734.2	-535.(10448.)
1500.	0.01090(0.00087)	0.00907	-0.00183	2.1(27.0)	740.7	1580.(20029.)
1750.	0.00970(0.00044)	0.01162	-0.00192	3.4(20.7)	745.6	2570.(15456.)
2000.	0.01238(0.00053)	0.01293	-0.00055	6.0(2.6)	749.4	4511.(1966.)
2250.	0.01554(0.00093)	0.01450	0.00104	4.8(5.1)	752.5	3635.(3832.)
2500.	0.01890(0.00108)	0.01555	0.00335	4.5(5.5)	755.0	3376.(4140.)
2750.	0.01164(0.00041)	0.01672	-0.00508	4.7(2.1)	757.0	3565.(1578.)
3000.	0.02034(0.01421)	0.01717	0.00317	4.8(1.7)	758.7	3607.(1324.)
3250.	0.01676(0.00034)	0.01782	-0.00106	5.5(2.2)	760.2	4167.(1683.)
3500.	0.01937(0.00117)	0.01920	0.00017	7.3(2.8)	761.4	5520.(2103.)
3750.	0.02115(0.00104)	0.02210	-0.00095	9.8(3.0)	762.5	7472.(2315.)
4000.	0.02448(0.00186)	0.02405	0.00043	9.6(2.4)	763.4	7309.(1845.)
4250.	0.02739(0.00154)	0.02720	0.00019	12.2(1.2)	764.2	9285.(941.)
4500.	0.03110(0.00278)	0.03063	0.00047	12.6(1.7)	764.9	9668.(1329.)
4750.	0.03372(0.00202)	0.03419	-0.00047	13.2(0.9)	765.5	10135.(658.)
5000.	0.03610(0.00256)	0.03759	-0.00149	13.4(1.8)	766.1	10227.(1370.)
5500.	0.04578(0.00364)	0.04421	0.00157	13.1(1.8)	767.0	10086.(1393.)
6000.	0.05097(0.00391)	0.05073	0.00024	12.9(1.2)	767.7	9934.(932.)
6500.	0.05686(0.00580)	0.05715	-0.00029	12.7(0.3)	768.3	9788.(194.)
7000.	0.06337(0.00430)	0.06347	-0.00010	12.5(0.0)	768.9	9634.(0.)
z micras A	P10exp adim B	P10fit adim C	P10exp-P10fit adim D	dP10fit/dz metros-l E	v m/s F	dP10fit/dt sec-l G
50.	0.07580(0.00641)	0.07744	-0.00164	-180.7(0.0)	544.5	-98391.(0.)
100.	0.07138(0.01823)	0.06845	0.00293	-179.0(28.8)	576.3	-103158.(16620.)
150.	0.06026(0.00448)	0.05954	0.00072	-177.4(19.4)	601.1	-106635.(11637.)
200.	0.04854(0.00512)	0.05072	-0.00218	-175.7(9.9)	621.0	-109110.(6140.)
250.	0.03999(0.00435)	0.04050	-0.00051	-174.9(0.4)	637.3	-111464.(262.)
300.	0.03583(0.00747)	0.03227	0.00356	-154.3(9.1)	650.7	-100403.(5899.)
400.	0.01588(0.01228)	0.01890	-0.00302	-113.1(28.0)	671.4	-75935.(18813.)
500.	0.01061(0.02230)	0.00966	0.00095	-71.8(0.0)	686.6	-49332.(0.)
z micras A	P11exp adim B	P11fit adim C	P11exp-P11fit adim D	dP11fit/dz metros-l E	v m/s F	dP11fit/dt sec-l G
50.	0.02660(0.00473)	0.02733	-0.00073	-136.6(0.0)	544.5	-74379.(0.)
100.	0.02605(0.00642)	0.02111	0.00494	-111.9(0.0)	576.3	-64488.(0.)
150.	0.00930(0.01173)	0.01613	-0.00683	-87.3(0.0)	601.1	-52458.(0.)
200.	0.01175(0.00490)	0.01239	-0.00064	-62.6(0.0)	621.0	-38875.(0.)
250.	0.01468(0.00442)	0.00987	0.00481	-37.9(0.0)	637.3	-24173.(0.)
300.	0.00745(0.00865)	0.00859	-0.00114	-13.3(0.0)	650.7	-8622.(0.)
400.	0.00932(0.01127)	0.00974	-0.00042	36.1(0.0)	671.4	24231.(0.)
z micras A	P12exp adim B	P12fit adim C	P12exp-P12fit adim D	dP12fit/dz metros-l E	v m/s F	dP12fit/dt sec-l G
50.	0.03909(0.00718)	0.04016	-0.00107	-183.5(0.0)	544.5	-99916.(0.)
100.	0.03420(0.00416)	0.03159	0.00261	-159.4(0.0)	576.3	-91862.(0.)
150.	0.02270(0.00787)	0.02422	-0.00152	-135.4(0.0)	601.1	-81389.(0.)
200.	0.01639(0.00351)	0.01805	-0.00166	-111.4(0.0)	621.0	-69179.(0.)
250.	0.01682(0.00600)	0.01308	0.00374	-87.4(0.0)	637.3	-55694.(0.)
300.	0.00677(0.00551)	0.00931	-0.00254	-63.4(0.0)	650.7	-41241.(0.)
400.	0.00582(0.00736)	0.00537	0.00045	-15.4(0.0)	671.4	-10306.(0.)
z micras A	P13exp adim B	P13fit adim C	P13exp-P13fit adim D	dP13fit/dz metros-l E	v m/s F	dP13fit/dt sec-l G
50.	0.01468(0.00502)	0.01332	0.00136	103.9(0.0)	544.5	56574.(0.)
100.	0.01203(0.01001)	0.01650	-0.00447	23.3(16.8)	576.3	13405.(9693.)
150.	0.02085(0.00647)	0.01564	0.00521	-57.4(102.7)	601.1	-34521.(61733.)
200.	0.00827(0.00937)	0.01073	-0.00246	-78.0(61.9)	621.0	-48438.(38459.)
250.	0.00220(0.00348)	0.00294	-0.00074	-92.4(73.6)	637.3	-58893.(46899.)
300.	0.00185(0.01100)	0.00396	-0.00211	-16.6(65.9)	650.7	-10802.(42868.)
400.	0.00636(0.00000)	0.00259	0.00377	-10.8(77.0)	671.4	-7218.(51698.)
500.	0.00044(0.00779)	0.00181	-0.00137	-4.9(0.0)	686.6	-3357.(0.)
z micras A	P14exp adim B	P14fit adim C	P14exp-P14fit adim D	dP14fit/dz metros-l E	v m/s F	dP14fit/dt sec-l G
50.	0.01468(0.00970)	0.01332	0.00136	103.9(0.0)	544.5	56574.(0.)
100.	0.01203(0.00245)	0.01650	-0.00447	23.3(16.8)	576.3	13405.(9693.)
150.	0.02085(0.00494)	0.01564	0.00521	-57.4(102.7)	601.1	-34521.(61733.)
200.	0.00827(0.00206)	0.01073	-0.00246	-78.0(61.9)	621.0	-48438.(38459.)
250.	0.00220(0.00484)	0.00294	-0.00074	-92.4(73.6)	637.3	-58893.(46899.)
300.	0.00185(0.00258)	0.00396	-0.00211	-16.6(65.9)	650.7	-10802.(42868.)
400.	0.00636(0.01505)	0.00259	0.00377	-10.8(77.0)	671.4	-7218.(51698.)
500.	0.00044(0.01748)	0.00181	-0.00137	-4.9(0.0)	686.6	-3357.(0.)
z micras	P15exp adim	P15fit adim	P15exp-P15fit adim	dP15fit/dz metros-l	v m/s	dP15fit/dt sec-l

A	B	C	D	E	F	G
50.	0.00175(0.00376)	0.00254	-0.00079	83.6(0.0)	544.5	45542.(0.)
100.	0.00627(0.00693)	0.00559	0.00068	38.6(52.0)	576.3	22234.(29985.)
150.	0.00912(0.00815)	0.00640	0.00272	-6.5(26.7)	601.1	-3895.(16025.)
200.	0.00065(0.00373)	0.00353	-0.00288	-19.8(30.6)	621.0	-12296.(19009.)
250.	0.00294(0.00512)	0.00281	0.00013	-25.6(44.3)	637.3	-16321.(28252.)
300.	0.00441(0.00387)	0.00324	0.00117	11.0(14.2)	650.7	7151.(9220.)
400.	0.00206(0.00805)	0.00352	-0.00146	-5.3(15.5)	671.4	-3559.(10393.)
500.	0.00268(0.00964)	0.00218	0.00050	-21.6(0.0)	686.6	-14824.(0.)

A: Posición de la tobera. $z=0$ no corresponde con el punto donde $M=1$.

B: Población obtenida a partir de las intensidades medidas en el laboratorio.

C: Ajuste puntual de la población.

D: Diferencia entre la población experimental y la ajustada.

E: Derivada en z de la población ajustada con su error.

F: Velocidad de expansión.

G: Derivada temporal de la población ($dP/dt=v*dP/dz$).

z micras H	nexp 10 ²² m ⁻³ I	nfit 10 ²² m ⁻³ J	nexp-nfit 10 ²² m ⁻³ K	Ttpoint Kelvin L	Ttsmo Kelvin M	Trpoint Kelvin N	Trfit Kelvin O
50.	97.1634	93.3036	3.8598	165.270	154.220(15.3)	138.480	147.520(9.3)
100.	68.9180	69.3677	-0.4497	143.470	136.550(13.7)	121.440	131.650(5.7)
150.	48.3971	52.8127	-4.4156	113.460	122.050(15.4)	121.270	118.600(5.3)
200.	40.6454	41.0504	-0.4050	107.940	109.960(6.4)	109.760	107.810(1.8)
250.	33.3581	32.5255	0.8326	98.180	99.790(7.3)	103.840	98.810(3.7)
300.	26.1739	26.2289	-0.0550	92.130	91.170(6.6)	89.630	91.240(3.9)
400.	16.9200	17.8648	-0.9448	73.900	77.480(8.3)	80.640	79.330(4.6)
500.	12.8372	12.8111	0.0261	66.120	67.170(3.4)	72.300	70.460(3.7)
600.	9.6814	9.5732	0.1082	59.880	59.200(1.7)	63.270	63.640(0.4)
700.	7.4301	7.3946	0.0355	52.900	52.890(1.7)	58.470	58.220(0.4)
800.	5.7560	5.8678	-0.1118	47.310	47.790(1.4)	53.560	53.790(0.6)
900.	4.7542	4.7610	-0.0068	44.070	43.590(1.2)	49.210	50.090(0.6)
1000.	3.9341	3.9354	-0.0013	40.080	40.090(0.6)	46.950	46.950(0.3)
1250.	2.5729	2.6058	-0.0329	32.770	33.420(0.9)	41.540	40.840(0.5)
1500.	1.8714	1.8474	0.0240	28.790	28.670(0.4)	36.690	36.450(0.2)
1750.	1.3690	1.3760	-0.0070	25.540	25.060(0.5)	32.110	33.220(0.5)
2000.	1.0727	1.0637	0.0090	20.840	22.180(1.6)	34.150	30.830(1.5)
2250.	0.8375	0.8466	-0.0091	20.500	19.820(2.3)	27.320	29.050(3.8)
2500.	0.6879	0.6896	-0.0017	17.690	17.830(0.6)	27.990	27.720(0.3)
2750.	0.5684	0.5724	-0.0040	16.350	16.140(0.7)	26.040	26.740(0.3)
3000.	0.4771	0.4828	-0.0057	16.420	14.680(1.0)	21.710	26.000(1.1)
3250.	0.4052	0.4126	-0.0074	12.530	13.410(0.9)	27.650	25.450(0.8)
3500.	0.3527	0.3567	-0.0040	12.740	12.300(0.6)	23.490	25.040(0.4)
3750.	0.3177	0.3114	0.0063	10.910	11.330(0.8)	26.700	24.740(0.8)
4000.	0.2711	0.2742	-0.0031	9.740	10.470(0.8)	27.000	24.510(1.6)
4250.	0.2371	0.2434	-0.0063	8.780	9.710(1.3)	27.580	24.340(1.5)
4500.	0.2303	0.2174	0.0129	9.080	9.040(0.7)	25.470	24.210(0.6)
4750.	0.1953	0.1954	-0.0001	8.450	8.440(0.8)	24.090	24.120(0.5)
5000.	0.1691	0.1766	-0.0075	5.980	7.910(1.5)	35.030	24.050(5.2)
5500.	0.1613	0.1463	0.0150	6.130	6.990(1.7)	32.200	23.960(5.0)
6000.	0.1234	0.1231	0.0003	4.910	6.240(1.2)	34.330	23.900(4.4)
6500.	0.1166	0.1051	0.0115	4.590	5.620(1.2)	35.880	23.880(4.0)
7000.	0.1108	0.0907	0.0201	4.220	5.100(0.0)	38.730	23.860(0.0)

H: Posición de la tobera. $z=0$ no corresponde con el punto donde $M=1$.

I: Densidad obtenida a partir de las intensidades de la banda Q ro-vibracional del n_2 .

J: Ajuste de la densidad experimental.

K: Diferencia entre la densidad experimental y la ajustada.

L: Temperatura traslacional calculada a partir de los puntos experimentales de densidad y temperatura rotacional.

M: Temperatura traslacional calculada a partir de los ajustes de los puntos experimentales de densidad y temperatura rotacional.

N: Temperatura rotacional experimental.

O: Ajuste de la temperatura rotacional.

* CUADERNO DE LABORATORIO *

POBLACIONES

Consideraciones iniciales

.....

Las medidas de enero del 2005 de 500 mbar indican que los datos experimentales obtenidos son útiles hasta 7-8 mm. Para el caso de 100mbar, se puede llegar hasta 3-4 mm. Por lo tanto, para 200 mbar, deberíamos poder llegar hasta una distancia de 4.5-5 mm con medidas aprovechables.

Mediremos entonces hasta 7 mm, para tener más puntos de los necesarios.

Preparación del experimento
.....

- 1) Pongo el cero del baratrón.
- 2) Enfoco la óptica a 60 cm⁻¹ en estático con una presión de cámara de unos 50 mbar de N₂.
- 3) Utilizo la Rayleigh para colocar la lámina de semionda. No toco el enfoque del sistema de colección. Lo más adecuado es utilizar la banda Q de la transición vibracional 2-1, pero los resultados con la Rayleigh son también buenos. La posición óptima es 133.4°
- 4) Centro la tobera en el eje de expansión con una rendija del monocromador de 50umx1mm. La tobera se ha ido +5.87 um desde el experimento anterior.
- 5) Coloco la pantalla.
- 6) Centro la tobera en el eje de colección a 2330 cm⁻¹ con el eje de la lámina de semionda en la posición paralela a la polarización del haz láser y habiendo enfocado burdamente. No tengo precisión suficiente para aumentar la señal de manera apreciable al mover la tobera. Compruebo que la posición de la lámina de semionda obtenida anteriormente es lo suficientemente buena.
- 7) Reenfoco a 60 cm⁻¹.
- 9) Medidas:

Condiciones experimentales:

- P0(precámara, Baratrón 1 bar)=201.10(0.05) mbar
- T(ambiente)=22.0(0.5)°C=295.0(0.5) K
- P(cámara, Baratrón 1 bar)=0.020(0.005) mbar
- Potencia del láser (2045)=5.8 W@514.5 nm
- S2=7 mmx15 mm

z (um)	Archivos	Comentarios
50	00-03 00poblaciones.crg	Con pantalla, 50umx1mm, 5x40, T=10s, 2 fotos
100	04-07	
150	08-11	
200	00-03 01poblaciones.crg	Sin pantalla, 50umx1mm, 5x74, T=10s, 2 fotos
250	04-07	
300	08-11	
400	12-15	
500	16-21	
600	00-03 02poblaciones.crg	Sin pantalla, 100umx5mm, 5x250, T=10s, 1 foto
700	04-07	
800	08-11	
900	12-16	
1000	00-03 03poblaciones.crg	Sin pantalla, 100umx10mm, 5x350, T=30s, 1 foto
1250	04-07	
1500	08-12	
1750	00-03 04poblaciones.crg	Sin pantalla, 150umx10mm, 5x400, T=30s, 1 foto
2000	04-07	
2250	08-12	
2500	13-17	
2750	00-04 05poblaciones.crg	Sin pantalla, 150umx10mm, 5x400, T=60s, 1 foto
3000	05-09	
3250	10-14	
3500	15-19	
3750	20-25	
4000	26-31	
4250	32-37	
4500	38-43	
4750	44-49	
5000	50-55	
5500	56-61	
6000	62-67	
6500	68-73	
7000	74-80	

Última posición de la tobera: -6999.69 um

DENSIDADES ABSOLUTAS

Consideraciones iniciales

.....

Debido a las consideraciones iniciales expuestas en la anterior sección, mediremos para 1, 3, 6 y 10 diámetros de tobera, es decir, a 300, 900, 1800 y 3000 um sin utilizar la pantalla.

Preparación del experimento
.....

- 1) Pongo el cero del baratrón.
- 2) Enfoco la óptica a 2330 cm⁻¹ en estático con una presión de cámara de unos 50 mbar de N₂.
- 3) Utilizo la banda Q rovibracional para colocar el eje de la lámina de semionda. La posición óptima es 88.0°.
- 4) Centro la tobera en el eje de expansión con una rendija del monocromador de 50umx1mm. La tobera se ha ido +6.02 um desde el experimento anterior.

- 5) Coloco la pantalla.
- 6) Centro la tobera en el eje de colección a 2330 cm⁻¹ utilizando una rendija para el monocromador de 150umx10mm y con la pantalla.
No parece haber variación alguna en un intervalo de +/-30 um centrado en el cero anterior. Lo dejo como está.
- 9) Medidas:

Condiciones experimentales:

- T(ambiente)=22.0(0.5) °C=295.0(0.5)K
- Potencia del láser (2045)=5.8W@514.5nm
- S2=7mmx15mm

z=300um

////////

S=50umx1mm, Agrup.=5x40, T=10s

Archivos=0#expansion300.crg, 0#estatico300.crg

#	Expansión			Estático	
	P0_inicial(mbar)	P0_final(mbar)	Archivos	P_camara(mbar)	Archivos
1	200.60(0.05)	200.55(0.05)	00-04	30.16(0.01)	00-04
2	200.90(0.05)	200.50(0.05)	00-04	30.24(0.01)	00-04
3	200.85(0.05)	200.35(0.05)	00-04	30.04(0.01)	00-04

z=900um

////////

S=100umx5mm, Agrup.=5x250, T=30s

Archivos=0#expansion900.crg, 0#estatico900.crg

#	Expansión			Estático	
	P0_inicial(mbar)	P0_final(mbar)	Archivos	P_camara(mbar)	Archivos
1	200.40(0.05)	200.25(0.05)	00-04	15.16(0.01)	00-04
2	200.50(0.05)	200.20(0.05)	00-04	10.06(0.01)	00-04
3	200.20(0.05)	199.95(0.05)	00-04	10.06(0.01)	00-04

z=1800um

////////

S=150umx10mm, Agrup.=5x400, T=60s

Archivos=0#expansion1800.crg, 0#estatico1800.crg

#	Expansión			Estático	
	P0_inicial(mbar)	P0_final(mbar)	Archivos	P_camara(mbar)	Archivos
1	200.00(0.05)	199.70(0.05)	00-04	5.17(0.01)	00-04
2	200.00(0.05)	199.50(0.05)	00-04	5.09(0.01)	00-04
3	199.90(0.05)	199.20(0.05)	00-04	5.07(0.01)	00-04

z=3000um

////////

S=150umx10mm, Agrup.=5x400, T=60s

Archivos=0#expansion3000.crg, 0#estatico3000.crg

#	Expansión			Estático	
	P0_inicial(mbar)	P0_final(mbar)	Archivos	P_camara(mbar)	Archivos
1	200.30(0.05)	199.80(0.05)	00-04	1.20(0.01)	00-04
2	200.30(0.05)	199.70(0.05)	00-04	1.22(0.01)	00-04
3	200.00(0.05)	199.50(0.05)	00-04	1.32(0.01)	00-04

Última posición de la tobera: -3000.35 um

DENSIDADES RELATIVAS

Consideraciones iniciales

.....

Las posiciones de tobera en las que mediremos serán las mismas que para las poblaciones.

Preparación del experimento

.....

- 1) Pongo el cero del baratrón (se ha ido unos 0.02 mbar).
- 2) Enfoco la óptica a 2330 cm⁻¹ en estático con una presión de cámara de unos 50 mbar de N₂.
- 3) Utilizo la banda Q rovibracional para colocar el eje de la lámina de semionda.
La posición que maximiza la señal es 85.3°.
- 4) Centro la tobera en el eje de expansión con una rendija del monocromador de 50umx1mm. La tobera se ha ido +2.61 um desde el experimento anterior.
- 5) Coloco la pantalla.
- 6) Centro la tobera en el eje de colección a 2330 cm⁻¹ utilizando una rendija para el monocromador de 150umx10mm y con la pantalla.
Parece que a -5.08um de la posición anterior mejora algo la señal.
- 9) Medidas:

Condiciones experimentales:

- P0(precámara,Baratrón 1 bar,inicial)=200.80(0.05) mbar
- P0(precámara,Baratrón 1 bar,final)=197.35(0.05) mbar
- T(ambiente)=22.0(0.5) °C=295.0(0.5) K
- P(cámara,Baratrón 1 bar)=0.020(0.005) mbar
- Potencia del láser (2045)=5.8 W@514.5 nm
- S2=7 mmx15 mm

z (um)	Archivos	Comentarios
50	00-09 00densidad.crg	Con pantalla, 50umx1mm, 5x20, T=10s
100	10-19	
100	00-07 01densidad.crg	Con pantalla, 50umx1mm, 5x40, T=10s
150	08-15	
200	16-23	
200	00-04 02densidad.crg	Sin pantalla, 50umx1mm, 5x74, T=10s
250	04-09	
300	10-14	
400	15-21	
500	22-28	
500	00-04 03densidad.crg	Sin pantalla, 100umx5mm, 5x250, T=10s
600	05-09	
700	10-16	
800	17-23	
900	24-31	
900	00-03 04densidad.crg	Sin pantalla, 100umx10mm, 5x350, T=30s
1000	04-07	
1250	08-12	
1500	13-18	
1500	00-03 05densidad.crg	Sin pantalla, 150umx10mm, 5x400, T=30s
1750	04-08	
2000	09-13	
2250	14-19	
2500	20-25	
2500	00-04 06densidad.crg	Sin pantalla, 150umx10mm, 5x400, T=60s
2750	05-09	
3000	10-14	
3250	15-19	
3500	20-26	
3750	27-31	
4000	32-36	
4250	37-41	
4500	42-46	
4750	47-51	
5000	52-58	
5500	59-64	
6000	65-70	
6500	71-77	
7000	78-85	

Última posición de la tobera: -6999.74 um